数理物理シリーズ

量子論における位相

矢吹治一 著

日本評論社

●

[編集]

荒木不二洋

江沢 洋

数理物理シリーズの刊行にあたって

「数理物理シリーズ」の刊行にあたり，数理物理学とは何かを説明し，シリーズの意図を明かにしておきたい．

物理学は自然の構造と仕組みを見極めようとする．これに対して数学は客観的な知識を目的とするあらゆる科学の理論を，簡単かつ厳密に表現する最上の記述形式を与えるものである．秋月康夫は『現代数学概観』(筑摩書房，1970) において「数学は元来，無限を対象とするもので，経験では得られない超限的な理論だ」ということを強調した．物理は，それを利用している．たとえば速度として測定できるのは有限時間 Δt におこる変位 Δx であるが，数学は極限 $\lim_{\Delta t \to 0} \Delta x/\Delta t$ を発明し，それによって Δt の選択によらない客観性を実現した．力学は，これに負うところが大きい．相転移の統計力学も無限系を考えることで明確に定式化される．

物理学と数学との接点に数理物理学はある．英語でいうと mathematical physics だ．物理数学というものもあるが，これは mathematical methods for physics だろう．

ロシアの R.L.Dobrushin は，統計力学を確率論的に深めた多くの著しい業績をもつが,「仕事は何か」と問われて「応用数学を純粋数学にすること」と答えたとか．これにならって，数理物理学とは物理に用いられた数学を純粋数学にすることだ，といってもよさそうだ．

かつて山内恭彦は，著書『物理数学』(岩波書店，1963) の序文にこう書いた：

> 科学の進歩に応じて，その理論を表わすのに適当な数学が要求され，ときに未熟な形で科学者に考案されて ⋯ まだ数学になり切っていない昆虫の幼虫みたいな時期のものがある．それは科学者からみると本質的の部分は間違いなく取り入れられていると思われるのであるが，数学者からみると甚だあやしげなものである．

山内は，これを数学に対する大きな栄養源であるとしつつ，その生の形を提示することが物理の学生には数学の理解に役立つと考えたのである．この見解の背景には，自らも開拓に参加した群論の量子力学への応用があり，また P.A.M.Dirac が量子力学の表記に用いた δ 関数を L.Schwartz が超関数として数学的に脱皮させたこと (1945) の衝撃がまだ生々しかったということがあるだろう．山内の近くでは佐藤幹夫がハイパー・ファンクションの理論を生みだしていた (1958)．後年，これは局所解析の理論として開花し，物理との交渉を一層つよめることになる．

物理学，あるいは広く科学の側からみても，その理論の表現を未熟な形に残すのは本意ではない．たとえば，量子力学で用いられる摂動級数は収束するのか，散乱問題の波動関数は時間 $t \to \infty$ でどう振る舞うのかなど，だれでも気になることである．これも山内の近くで，加藤敏夫は J.von Neumann 作の『量子力学の数学的基礎』という額縁に細密画を描き入れはじめ，それは世界的に大きな潮流をよびおこすにいたった．

場の量子論では，発散の困難に促された数学的な分析が A.S.Wightmann や R.Haag らによって 1950 年前後からはじめられた．彼らは数学的な注意深さなしには一歩も前進できないと考えたのである．その努力の中で物理的にも興味ふかい多くの数学的現象が次々に発見された．それは量子力学の定式化に反省を促したばかりでなく，今日では無限自由度の多体問題，統計力学をとおして物性物理にも波及している．

Dobrushin のいう「純粋数学にすること」は，単に数学のためばかりではないのである．

こうして，数理物理学の発展は始まった．上の例は量子力学の方面に偏っているが，ほかにも相対論あり，非線型問題ありで及ぶところは広くかつ深い．最近では，わが国でも物理学者の関心が高まり，数学者の参加も急増している．

しかし，新興分野の常として，これから勉強をはじめる学生や多分野の研究者がこれについて知ろうとすると，すぐ読める教科書がなく，個々のトピックスについて専門誌から探し集めた断片的な情報を自己流にまとめるほかない．

この「数理物理シリーズ」は，このような状況に応えるために企画した．研究の第一線につながる入門書を提供し，さらには数理物理学の動きを生き生きとした姿で広い層に伝えたい．

この目的のためには，シリーズ全体としても，また一冊一冊においても，基礎的な部分のわかりやすい解説と，主題の雰囲気を伝える中心的な概念構成や理論の展開，その分野の展望とその中での位置づけなど，いろいろの要素がバランスよく混ざっていることが望ましい．それを読みやすい長さにまとめるには，題材の選択も必要となろうし，証明や説明にも，細部にこだわらず本質を突くわかりやすさを狙った工夫が必要になることも多かろう．細部まで完全なていねいな説明が望まれる場合には，躊躇しない．

このシリーズは，物理学の人には数学を，数学の人には物理を近づきやすくするものでなければならない．物理の理論の数学的展開はもとより，数理物理学でよく使われる数学や，物理学に触発されて進展した数学のトピックスも取り入れて，物理と数学が有機的に混じり合ったものにしたい．山内のいう「昆虫の幼虫」も，それとわかる形にすれば入れてよいだろう．理論の発展史も役に立つだろう．物理の理論の新展開に数学の側からの自由なコメントを組み合わせて一冊とすることも試みたい．

こうして,「数理物理シリーズ」は，基礎的なテーマに時の話題を加えて，特に若い人々の興味をかきたて，物理と数学の両方の人々の役に立つようなものに育ててゆきたい．このシリーズに終わりはない．物理，数学にも数理物理にも終わりはないはずだから．

御声援を心からお願いする．

1998 年 4 月

編者/荒木不二洋 (東京理科大学)

江沢 洋 (学習院大学)

はしがき

私はこの本で，量子論における位相，つまり Schrödinger 波動関数の位相 (phase) が大きな役割を果たすいくつかの物理学的問題を解説したいと思った．この解説は，いわば量子力学の練習問題のような形で行いたいと思った．そのため，何よりも量子力学を学び始めた学生に役立つような内容にしようと努力した．そこで，この本以外の本や文献を次から次へと参照しなくても学習できるように，私に可能な範囲内で，種々の予備的知識の解説も行った．しかし，この本で何もかも始めから説明するということは不可能であり，また場合によっては説明が前後することも避けられなかった．

話題としてまず，私自身がしばらくの間その研究に関係した多重連結領域での量子力学を取り上げたいと思った．ここでは，例えば，Huygens 以来物理学において重要な概念となっている重ね合わせの原理とか波動関数の一価性が問題となる．しかし，結局このテーマは最後の第 6 章で論ずることとし，この本の主要な部分は Berry の位相を中心として展開することにした．

この Berry の位相は，1983 年に Berry によって一般的な定式化が与えられたものである．今となってはこれが，なぜこんなに最近になってやっと見つけられた (再認識された) のかが不思議なくらい量子力学にとって基礎的な事項である．そして，Berry の位相が量子力学の理論の基礎的領域に位置づけられる，という事実の反映として，この位相は直ちに物理学の多様な方面へ適用されて，各種の問題の解明に役立っている．この Berry の位相に関する詳しい入門的解説を試みた．Berry の位相のいくつかの簡単な具体例も提示することにしたが，これらの例においては，パラメタ空間中に磁気単極子が現れる．

そこで，まずこの本においては，ウォーミング・アップというつもりで，Dirac の磁気単極子を紹介することにした．Dirac は，波動関数の位相の性質

を詳しく分析することから，この磁気単極子の存在の可能性，及びこれから電荷の量子化という画期的結果を導いたのであるから，この磁気単極子をまず最初に論ずることは，この本の目的にもぴったりあてはまると判断した．というわけで次ページのような目次配列となった．この分野を学習中あるいはこれから学習しようとしている学生諸君の役に立てば幸いである．

なお，本書の執筆を勧めてくださり，また出版に関して気を配っていただいた荒木不二洋先生，江沢洋先生，そしてまた編集者の亀井哲治郎氏，高橋健一氏に感謝したい．

1998 年 7 月

矢吹治一

目次

第 1 章

序説：量子力学とその波動関数

量子力学の Schrödinger による表現形式は次の方程式に集約される：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t) = H(q,p,t)\psi(q,t). \tag{1.1}$$

この偏微分方程式 (1.1) が Schrödinger 方程式と呼ばれるものであり，この表現形式は Schrödinger 描像と呼ばれている．量子力学のきちんとした導入はこの章の目的ではないが，以下の章で必要となる量子力学のキーワードについてはここで解説しておきたい．量子力学をきっちりと理論的に定式化するには，細かい条件を種々考慮しなければならない．さらに，様々な問題を考察するためには，色々とそのための道具を準備せねばならないが，とりあえず今は必要最小限のところだけから出発しよう．量子力学の教科書については，すでに名著が幾つか存在する [1].

さて，Schrödinger 方程式 (1.1) の意味を具体例を用いて説明しよう．1 次元ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & (x \geqq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases} \tag{1.2}$$

の中にある質量 m の粒子の運動を考えたいとしよう (図 1-1)．あるいは，3 次元空間中の粒子に対して，ポテンシャル $V(x,y,z)$ が式 (1.2) のように y,z に依存せず，しかもこの粒子の運動も y,z に依存しない場合を考える，といってもよい．この 1 次元空間は x の正負両方向に無限に延びているとする．

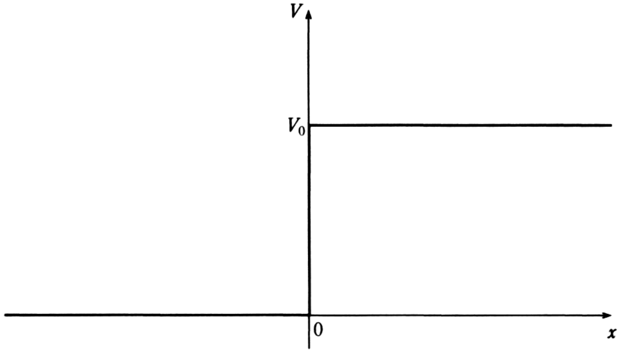


図 **1-1**　簡単な 1 次元ポテンシャル.

我々の粒子は x 軸の負の遠方から x 軸の正の向きに飛んでくるとする．また，V_0 は正とする．

A.　まず最初にこの問題を古典力学で考える．粒子に働く力 $F(x)$ は

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \tag{1.3}$$

であり，式 (1.2) の $V(x)$ に対しては (1.3) の $F(x)$ は $x=0$ で定義できない．そこで，問題を少し変形して，

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ \dfrac{V_0}{d_0}x & (0 \leqq x < d_0) \\ V_0 & (d_0 \leqq x) \end{cases} \tag{1.4}$$

としてみよう (図 1-2)．ここで導入したパラメタ d_0 が十分小さければ，式 (1.4) と (1.2) で物理的状況は本質的に同一だろう．式 (1.4) のポテンシャルに対して力は，

$$F(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ -\dfrac{V_0}{d_0} & (0 < x < d_0) \\ V_0 & (d_0 < x) \end{cases} \tag{1.5}$$

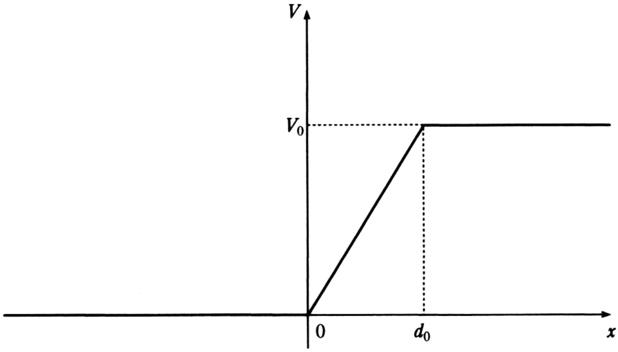


図 1-2　図 1-1 を少し変形したポテンシャル.

となる．つまり，$0 < x < d_0$ の範囲で x の負の方向へ向かう一定の力が働く．$x = 0$ と $x = d_0$ では式 (1.4) の $V(x)$ に対して式 (1.3) の微分は定義できないが，以下これは重要ではない．気になる人は $x = 0$ と $x = d_0$ の付近で $V(x)$ の形を滑らかにしておけばよい．

2 つの場合にわけて考える．(1) この粒子のエネルギー E が V_0 より大きい場合：$E \geqq V_0$．(2) E が V_0 より小さい場合：$0 < E < V_0$．いずれの場合も，問題の粒子が初めて $x = 0$ を通過する時刻を $t = 0$ とすると，Newton の運動方程式 $F(x) = md^2x/dt^2$ から $0 \leqq x \leqq d_0$ に対して，

$$\frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2E}{m}} - \frac{V_0}{md_0}t, \tag{1.6}$$

$$x = \sqrt{\frac{2E}{m}}t - \frac{V_0}{2md_0}t^2 \tag{1.7}$$

となる．

A-1　$E \geqq V_0$ の場合

式 (1.6)，(1.7) から速度 $v = dx/dt$ の時間変化は図 1-3 のようになる．この物理的意味はもちろん，次のように明らかである．$0 \leqq t \leqq t_1$ の間，粒子は $0 \leqq x \leqq d_0$ の範囲にあって負の方向の力の作用のもとで減速する．$t_1 < t$ つまり $d_0 < x$ のとき，この粒子に力は働かず，一定の速度 $\sqrt{2(E - V_0)/m}$ で右方へ飛び去る (なお，もちろん $E = V_0$ の場合にはこの粒子は $x = d_0$ で静止する)．

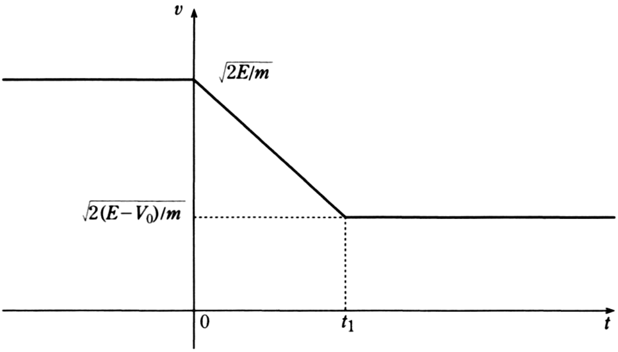


図 1-3　$E \geqq V_0$ の場合．速度 v の時刻 t に対する依存性．$t_1 = \dfrac{md_0}{V_0}\left(\sqrt{\dfrac{2E}{m}} - \sqrt{\dfrac{2(E-V_0)}{m}}\right)$.

A-2　$0 < E < V_0$ の場合

この場合，粒子の速度変化は図 1-4 のようになる．時刻 $t = t_2$ で粒子は $x = d_2 \equiv Ed_0/V_0$ に達し，そこで，運動の方向を変えて，負の方向へ引き返す．

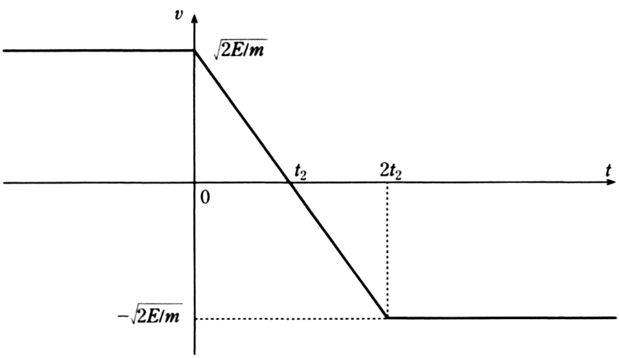


図 1-4　$0 < E < V_0$ の場合．速度 v の時刻 t に対する依存性．$t_2 = \dfrac{md_0}{V_0}\sqrt{\dfrac{2E}{m}}$．$t = t_2$ のとき，$x = Ed_0/V_0$；$t = 2t_2$ のとき，$x = 0$ である．

なお，上のいずれの場合もエネルギーの保存則［運動エネルギー＋ポテン

シャル・エネルギー ＝ 一定］が成立していることが確かめられる．もとの問題に戻るには，$d_0 \to 0$ として考えればよいわけで，このとき，$x=0$ $(t=0)$ のところで一瞬のうちに粒子の運動状態が変化すると見なされる．

B.　では次に，この問題を量子力学で取り扱ってみよう．

このような種類の問題に対する量子力学の計算のルール，およびこれに対応するキーワードは，大ざっぱにいえば，次の通りである．

1. 対応原理 (correspondence principle)：

考察の対象としている粒子 (例えば電子) が，その特定の問題の環境のもとで持つエネルギーを古典力学的に求めて，それを $H(q,p,t)$ とする．ここで，q,p はこの粒子の直角座標および運動量である ($q_1, q_2, q_3, \cdots$ をまとめて q と書いた．p についても同様である)．例えば，1 次元ポテンシャル $V(q)$ の中を運動する 1 電子の場合には

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \tag{1.8}$$

となる．

2. 量子化 (quantization)：

運動量 p の各成分 p_i を対応する座標 q_i によって，次のように読み替える：

$$p_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}. \tag{1.9}$$

3. 波動関数 (wave function)：

方程式 (1.1) の解 $\psi(q,t)$ を問題に応じた境界条件のもとで解く (通常は厳密に解けることはまれで，近似解を求める)．

4. 確率解釈 (probability interpretation)：

問題の粒子がその座標の区間 $(q_i, q_i + dq_i)$ に見つかる確率は

$$|\psi|^2 dq$$

によって与えられる．ここで dq は dq_i の積である．したがって，全確率が 1 という条件は，

$$\int |\psi|^2 dq = 1 \tag{1.10}$$

となる．物理量 O (運動量とかエネルギーとか) の期待値は

$$\int (\psi^\dagger O \psi)\, dq \tag{1.11}$$

によって与えられる．ここで，$\psi^\dagger$ は ψ の Hermite 共役である．式 (1.10), (1.11) の積分は考察対象の座標の全範囲について行う．したがって，波動方程式 (1.1) の解 ψ としては式 (1.10)，(1.11) が意味を持つようなもの，つまりこれらの積分が原理的には計算できるようなものを考えねばならない．特に，エネルギーの期待値は

$$\int (\psi^\dagger H \psi)\, dq \tag{1.12}$$

である．

* * * * * * *

ここで，粒子の存在確率の保存について考えておこう．簡単のため空間 1 次元で考察することにし，x 軸上の区間 $a \leqq x \leqq b$ に粒子が存在する確率が時間的にどう変化するかを計算する．つまり，$\dfrac{\partial}{\partial t}\displaystyle\int_a^b |\psi|^2 dx$ を計算する．Schrödinger 方程式 (1.1) を用いると，

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b |\psi|^2 dx &= \int_a^b \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi\, dx + \int_a^b \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}\, dx \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\int_a^b (H\psi)^* \psi\, dx + \frac{1}{i\hbar}\int_a^b \psi^* (H\psi)\, dx\end{aligned} \tag{1.13}$$

となり，ハミルトニアン H (1.8) に (1.9) を用いて部分積分を行うと，

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b |\psi|^2 dx = &-\frac{1}{i\hbar}\int_a^b \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m}\psi + V\psi\right)^* \psi\, dx \\ &+\frac{1}{i\hbar}\int_a^b \psi^* \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m}\psi + V\psi\right) dx\end{aligned}$$

$$
= \frac{-\hbar}{2mi}\left[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi\right]_{x=a}^{x=b}
$$

$$
= -f(b) + f(a) \tag{1.14}
$$

となる．ここで，$\nabla = \partial/\partial x$ であり，また

$$
f(x) = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi)^*\psi) \tag{1.15}
$$

とおいた．式 (1.14) の意味は，存在確率が $x = b$ のところで $f(b)$ だけ減少し，$x = a$ のところで $f(a)$ だけ増加するということである．粒子が突然消えてなくなったり，出現したりすることはないとすると，$f(x)$ は x 方向への確率の流れを表していると解釈できる．

*　*　*　*　*　*　*

さて項目 1 の対応原理により，我々のハミルトニアン H は，

$$
H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{1.16}
$$

である．ここでポテンシャル $V(x)$ は式 (1.2) のものであり，p は 1 次元座標 x に共役な運動量である．次に項目 2 に従い，

$$
p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{1.17}
$$

と読み替えて，ハミルトニアン $H(x,p)$ を量子力学のハミルトニアンとする：

$$
H(x,p) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x). \tag{1.18}
$$

このハミルトニアンを用いて，Schrödinger 方程式

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H(x,p,t)\psi(x,t) \tag{1.19}
$$

を解こう．このステップが上記の項目 3 である．この問題の場合の物理的状況は，まずは x 軸の負の遠方から正の方へエネルギー E の粒子が飛んでくる

ということである．エネルギーは保存するに違いないので，エネルギーが定まった値 E をとる場合の Schrödinger 方程式を考えることになる．そこで，

$$\psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\phi(x) \tag{1.20}$$

という式で関数 $\phi(x)$ を導入すると，Schrödinger 方程式は

$$H(x,p)\phi(x) = E\phi(x) \tag{1.21}$$

となる．このようにすると，ψ に対しても ϕ に対してもハミルトニアンの期待値が E となることが項目 4 の式 (1.12) をみればすぐわかる．実際のところは，こうなるように式 (1.20) における時間依存性を $e^{-iEt/\hbar}$ としたのである．関数 ϕ も ψ と同様に Schrödinger 波動関数と呼ばれる．

さて，x 軸の負の範囲で方程式 (1.21) は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d}{dx}\right)^2\phi(x) = E\phi(x) \tag{1.22}$$

となる．この解は一般には，

$$e^{ikx} \tag{1.23}$$

と

$$e^{-ikx} \tag{1.24}$$

の線形結合である．ここで

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}, \quad k > 0 \tag{1.25}$$

とおいた．

さてここで，少し立ち止まって考えねばならないことがある．波動関数 (1.23)，(1.24) およびこれらの線形結合に対しては，粒子の存在の全確率を 1 にはできない，つまり，式 (1.10) を満たすようにはできない，という事態になっているのである．(1.10) の積分が $x < 0$ の範囲ですでに発散するからである．そこで，(1.23) の場合，つまり波動関数 $\psi(x) = A\exp(ikx)$ に対して確率の流れ (1.15) を計算してみると，

$$f(x) = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

となる．この結果により，波動関数 $\psi(x) = A\exp(ikx)$ は x 軸の正の方向に粒子が速度 $v = \hbar k/m$ で一様に流れている状態を表現している，ということがわかる．(1.24) の場合は，同様に x 軸の負の方向に粒子が速度 $v = \hbar k/m$ で一様に流れている状態を表現している．このような状況では x 軸上での粒子の全存在確率が発散するのは当然である．したがって，このような問題 (粒子の散乱問題) では，粒子の全存在確率が 1 という要請は放棄して，その代わり粒子の確率の流れに注目するのが 1 つの便宜的立場である[1]．そこで，

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x < 0 \tag{1.26}$$

という具合に，$x < 0$ での方程式 (1.22) の解を書くのだが，第 1 項は入射波を，第 2 項は反射波を表していることになる．ここで A, B は定数 (一般には複素数の定数) である．

次に，$x \geqq 0$ の範囲で，Schrödinger 方程式 (1.21) は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d}{dx}\right)^2 \phi(x) = (E - V_0)\phi(x) \tag{1.27}$$

となる．ここで古典力学の場合と同様に $E \geqq V_0$ と $0 < E < V_0$ の場合にわけて考えることにする．

B-1　$E \geqq V_0$ の場合

方程式 (1.27) の解は一般には

$$\phi(x) = Ce^{ilx} + De^{-ilx}, \quad x \geqq 0 \tag{1.28}$$

と書ける．ここで

$$E - V_0 = \frac{\hbar^2 l^2}{2m}, \quad l \geqq 0 \tag{1.29}$$

とおいた．(1.28) の第 2 項は x 軸を負の向きに進む波動を表している．しかし物理的に考えて，このような波はありえないので，$D = 0$ である．確率密

[1] この問題を数学的に厳密に考察するためには，粒子の全存在確率を 1 とする立場を守り，粒子の一様な流れではなく波束状態を導入して議論を進める．

度および確率の流れは x に関して連続でないと困るので，波動関数および波動関数の x についての 1 階微分は連続でなければならない．そこで，$x < 0$ の解 (1.26) と，$x \geqq 0$ の解 (1.28) が $x = 0$ でうまくつながるために

$$A + B = C \tag{1.30}$$

$$ikA - ikB = ilC \tag{1.31}$$

が要求されることになる．この 2 つの式から

$$C = \frac{2k}{k+l}A \tag{1.32}$$

$$B = \frac{k-l}{k+l}A \tag{1.33}$$

となる．したがって，反射係数は入射波の確率の流れと反射波の確率の流れの比なので，確率の流れの式 (1.15) を用いて計算すると

$$\frac{k|B|^2}{k|A|^2} = \frac{(k-l)^2}{(k+l)^2} \tag{1.34}$$

となり，透過係数は同様にして，

$$\frac{l|C|^2}{k|A|^2} = \frac{4kl}{(k+l)^2} \tag{1.35}$$

となる．古典力学ではこの場合，粒子が $x = 0$ で反射するということは生じないのに対し，量子力学的粒子の場合，反射する確率は 0 とはならない．

B-2　$0 < E < V_0$ の場合

方程式 (1.27) の解は一般には

$$\phi(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, \quad x \geqq 0 \tag{1.36}$$

と書ける．ここで

$$E - V_0 = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}, \quad \kappa > 0 \tag{1.37}$$

とおいた．この式で $D \neq 0$ とすると，x が正で大きな値をとるに従って，そのあたりでの粒子の存在確率が増大するということになり，今考えている物理的状況に反する．したがって，$D = 0$ である．$x = 0$ での連続性の条件から

$$A + B = C \tag{1.38}$$

$$ikA - ikB = -\kappa C \tag{1.39}$$

となり，これを解くと

$$C = \frac{2k}{k + i\kappa} A \tag{1.40}$$

$$B = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} A \tag{1.41}$$

となる．このとき，反射係数は

$$\frac{k|B|^2}{k|A|^2} = 1 \tag{1.42}$$

ではあるが，$C \neq 0$ であり，$x > 0$ の領域に粒子が存在する確率は 0 ではなくなる．しかし透過係数は 0 である．

以上が量子力学の 1 つの簡単な具体的計算例である．

さて，量子力学は波動関数 $\psi(q, t)$ というものを，その理論の一つの基本的構成概念としている．これは，Schrödinger 描像でも，Heisenberg 描像でも，それ以外のものでも，つまり描像とは無関係に，量子力学にとって基本的なものである．この波動関数が担う状態という「物理量」は古典力学にはなかったものである．波動関数は本質的には複素数の量である．そして，波動関数の物理学的意味は,「波動関数は確率振幅である」ということである．つまり，$\psi(q, t)$ の絶対値の 2 乗が確率密度の意味を持つ (上記第 4 項)．この確率解釈の要請だけならば，波動関数が複素数である必要はない．もう一つ，量子力学にとって重要な要請がある．それは，状態の線形性である．量子力学の波動関数は線形方程式に従い，重ね合わせの原理 (superposition principle) を満たさなければならない．Schrödinger 方程式は線形なので，その解はこの要請を満たす．

ここで良く引き合いに出される例は，Young の二重スリットの実験に対応する状態 ψ である．図 1-5a に対応する状態の波動関数を ψ_a，図 1-5b に対応するものを ψ_b とすると，図 1-5c に対応する波動関数 ψ は

$$\psi = N(\psi_a + \psi_b) \tag{1.43}$$

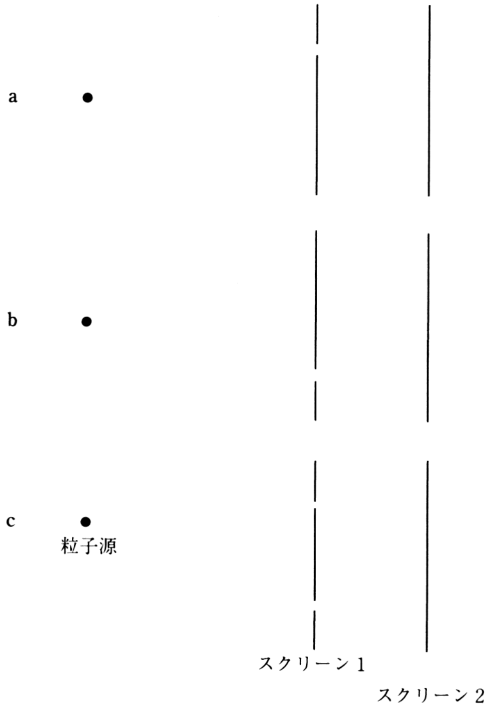


図 1-5 粒子源から出発した粒子は，スクリーン 1 のスリットを通過して，スクリーン 2 に到達する．スクリーン 1 のスリットは，a の場合: 上方に 1 個，b の場合: 下方に 1 個，c の場合: 上下にそれぞれ 1 個ずつある．スクリーン 2 上で観測を行う．

で与えられる．N は複素数の定数である．このとき，$\psi_{\rm a}$ と $\psi_{\rm b}$ の間の相対的な位相 (phase) の差は ψ に対して重要である．この位相差によって，(1.43) 式の絶対値の 2 乗が量子力学に特徴的な干渉パターンを与える．この例のように，状態の線形的重ね合わせの原理によって，波動関数の位相が量子力学にとって重要な役割を果たすことになる．

なおついでながら，図 1-5a，b，c に対応する Schrödinger 方程式はすべて境界条件が異なるので，厳密にいえば $\psi = N(\psi_{\rm a} + \psi_{\rm b})$ という (1.43) の重ね合わせは成立しない．しかし近似的には成立している．この点については，後に (6 章 3 節) 詳しく述べる．

本書では，この波動関数の位相が基本的な役割を演ずる大変興味深い現象の実例を幾つか紹介する．まず最初に，Dirac の磁気単極子 (magnetic monopole) について論ずる．次に，本書の主要テーマである Berry の位相について詳しく述べる．この Berry の位相は，Hannay の角度と呼ばれる古典力学的対応物を持つ．そこで，この Berry の位相と Hannay の角度との関係についても調べる．最後に，多重連結領域での量子力学 (Aharonov-Bohm 効果等) の問題を論ずる．

これらの目的のために必要な道具，つまり，量子力学における断熱定理，古典力学の正準形式，量子力学の径路積分による定式化，微分幾何学 (ファイバー束，接続，ホロノミー等) 等については，その都度簡単な解説を与える．

Planck 定数 (を 2π で割ったもの) $\hbar$ と光速度 c は，話題に応じて適宜 1 とおく．

第 2 章

Diracの磁気単極子

2-1 節　波動関数の位相に対する一般的考察

ある特定の 1 つの Schrödinger 方程式を与えられた境界条件のもとで解いた 1 つの解 ψ を考えよう．この波動関数 ψ は 1 成分波動関数とする．波動関数 ψ の複素数値を極表示して，

$$\psi(q,t) = A(q,t)\exp(i\beta(q,t)) \tag{2.1}$$

と書こう．ここで，もちろん A と β は実数値関数である．境界条件は $|\psi(q,t)|^2$ にのみ依存していると仮定する．さて，この波動関数 ψ に定数の位相を付け加えて得られる新しい波動関数 ψ' を考えてみる．ψ' が ψ と同じ波動方程式の解であり，実験との比較における理論的結論においても ψ' と ψ の間で何の差異もないことは明らかである．つまり，

$$\begin{aligned} \beta(q,t) &\longrightarrow \beta'(q,t) = \beta(q,t) + \text{constant}, \\ \psi(q,t) &\longrightarrow \psi'(q,t) = A(q,t)\exp(i\beta'(q,t)) \end{aligned} \tag{2.2}$$

としても $\psi'(q,t)$ が表す物理的内容は $\psi(q,t)$ と同一である［第 1 節の第 4 項］．したがって，ある特定の 1 点 (q,t) での β の値は物理的意味を持たない，ということになる．しかし，$\beta(q,t)$ と $\beta'(q,t)$ に共通の性質は，異なる 2 点におけるそれらの値の差は等しいということである．つまり，波動関数の

位相が意味を持つとすれば，その**異なる 2 点**における値の差のみにあるといえる．

ここで，1 つの一般化を試みる (これは，Dirac が 1931 年の論文 [2] で考察したことである)．つまり，波動関数の位相は，その (任意の 2 点ではなくて) **近傍の 2 点**での値の差のみが確定した値を持つとする．したがって，遠く離れた 2 点間の値の差は，その 2 点を結ぶ径路に依存してもよい，と仮定する．つまり，ぐるっと 1 周回ると，また元の点に戻るような閉回路について，最初と終わりで位相の値が異なっていてもよい，と仮定するのである．波動関数の 1 価性を要求すると，この差の値は 2π の整数倍でなくてはならない．ここでは ψ に対しては 1 価性を要求しないことにする．このように，位相の非可積分性 (non-integrability) を仮定して，理論の応用上曖昧さが生じないための条件を求めよう．

そこで，波動関数 ψ を確定した位相を持つ部分 $\psi_1(\vec{x}, t)$ と非可積分の位相 γ の部分にわけて

$$\psi = \psi_1 e^{i\gamma} \tag{2.3}$$

と書くことにする (この分離は一意的ではないが，以下の議論に影響しない)．以下では 3 次元空間中を運動する 1 粒子を問題とする．座標 q は直角座標であり，これを $\vec{x}$ と書く．ここで，位相 γ はその勾配 (gradient)

$$a_\mu(\vec{x}, t) = \partial_\mu \gamma \tag{2.4}$$

が確定した値を持つ．しかし，可積分性 (integrability) の条件

$$\partial_\mu a_\nu = \partial_\nu a_\mu, \quad \mu \neq \nu \tag{2.5}$$

は必ずしも成立しない．ここで，

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \quad \mu = 0, 1, 2, 3\ ; \quad t = x^0, \quad \vec{x} = (x^1, x^2, x^3) \tag{2.6}$$

とおいた．x^μ は Minkowski 空間の座標である．以下では 3 次元空間ベクトルを $\vec{A} = (A^1, A^2, A^3)$ と書く．ただし，微分演算子だけは例外で，$\vec{\nabla} = (\partial_1, \partial_2, \partial_3)$ とする．

まず最初に，第 1 節第 4 項にある波動関数の確率解釈の要請は γ に対して何の制限も与えないことを見ておこう．確率および物理量の期待値の式においては，波動関数に対して必ずその複素共役が対でかけ算されているから ψ と $\psi^\dagger$ とで位相は打ち消してしまう［物理量 O が微分演算子を含んでいても，位相を微分した部分は式 (2.4) の確定した値を与える］．

しかし，この確率解釈に関係しては，

$$\int (\psi^\dagger O \phi)\, dx\, dy\, dz \tag{2.7}$$

という積分も理論の応用において考察の対象になることがある．この量 (2.7) は，物理量 O の (2 つの波動関数 ψ と ϕ に関する) 行列要素であり，$O=1$ の時には，式 (2.7) は 2 つの状態の間の重なりの割合を与える．したがって，この積分 (2.7) は確定した絶対値を持つ必要がある．つまり，任意の物理量 O と任意の閉回路について式 (2.7) の絶対値は確定した値を持たねばならない．そうすると，これらの積分がきちんと計算できるために，これらの被積分関数の 2 点間の位相差は確定した値を持っていなければならないことになる．このためには，任意の波動関数の対 ψ と ϕ が閉回路については 2π の整数倍を除いて同一の位相差を持つことが必要になる．逆に，これらの位相差が 2π の整数倍を除いて同一ならば積分 (2.7) において位相部分からの困難は生じない．このことから，任意の閉回路についての波動関数の位相変化は，すべての波動関数について同一 (mod 2π) でなければならない，と結論できる．

ここで，式 (2.3) に対応して

$$\phi = \phi_1 e^{i\eta}, \tag{2.8}$$

式 (2.4) に対応して

$$b_\mu(\vec{x}, t) = \partial_\mu \eta \tag{2.9}$$

と書くことにする．閉回路 C に対する波動関数 (2.3) と (2.8) の位相差が等しい (mod 2π) ということ，つまり

$$\int_C a_\mu ds^\mu - \int_C b_\mu ds^\mu = 2n\pi, \quad n = \text{整数} \tag{2.10}$$

という表式をもう少し詳しく考えてみよう．

まず，次の 2 つの**条件**が満たされている場合を調べることにする：

1. 閉回路 C を連続的に変形して 1 点に縮小できる.
2. a_μ と b_μ が今考えている閉回路 C の内部で連続的に定義されている.

このような場合には，閉回路 C を 1 点に縮小していくと式 (2.10) の左辺は連続的に 0 に近づく．他方，右辺の方は整数 n が 0 でない場合には，このように連続的に 0 に近づくということは不可能である．したがって，上の 2 つの条件が満たされているときには，式 (2.10) において $n=0$ であると結論できることになる.

さて，今からしばらくの間，これらの 2 条件がすべての閉回路 C と波動関数の対 ψ と ϕ に対して成立しているとして先へ進むことにする．式 (2.10) で $n=0$ とすると，Stokes の定理により，

$$\oint (a-b)_\mu ds^\mu = \iint \big(\mathrm{rot}(a-b)\big)_{\mu\nu} dS^{\mu\nu} = 0 \tag{2.11}$$

となる．ここで，ds^μ および $dS^{\mu\nu}$ は，それぞれ閉回路の線要素および閉回路を周とする曲面の面積要素である．式 (2.11) がすべての曲面について成立するためには

$$\mathrm{rot}(a-b) = 0 \tag{2.12}$$

でなければならない．したがって，a と b の差はあるスカラー関数の勾配となる.

$$a - b = \mathrm{grad}\,\delta.$$

つまり，式 (2.4) と (2.9) を用いて

$$\mathrm{grad}(\gamma - \eta - \delta) = 0 \tag{2.13}$$

となる．ここで，式 (2.13) の解に対する定数の不定性を δ に押し込むと

$$\eta = \gamma - \delta \tag{2.14}$$

となる．この η に対する表式を式 (2.8) に代入するとき，スカラー関数 δ を位相 η からはずして ϕ_1 の方へ含めることができる.

結局，非可積分の位相 γ はすべての波動関数に共通であると見なすことができる．このことから直ちに，波動関数の重ね合わせの原理が，非可積分位相の存在と矛盾しないことがわかる．また，波動関数 ψ_1 に対して 1 価性を要求することも一般的には可能である．

この非可積分位相 γ が，すべての波動関数に共通であるということから，この γ の存在は力学系自身の性質であり，個々の系の状態とは無関係ということになる．今ここで例として考えているような 1 粒子系の場合には，この位相 γ は，この粒子が置かれているその背景の力の場と関係しているはずである．

さて，ψ に対する Schrödinger 方程式において運動量 p_μ が ψ に作用するところは，

$$p_\mu \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \psi = e^{i\gamma} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \hbar a_\mu \right) \psi_1 \tag{2.15}$$

である．一方，電磁場と電荷 e の粒子の間の相互作用は，極小相互作用の原理，すなわち

$$p_\mu \longrightarrow \left(p_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) \tag{2.16}$$

という置き換えによって与えられる．つまり，ハミルトニアン $H(q,p,t)$ において式 (2.16) の置き換えをして求まる新しいハミルトニアン $H\left(q, p - eA/c, t\right)$ が，元の環境プラス電磁ベクトル・ポテンシャル A_μ という新しい環境を記述するハミルトニアンとなる．このとき，Schrödinger 方程式において $\partial/\partial t$ のところは p_0 に対応して式 (2.16) の変換を行う．したがって，ψ が電磁場と相互作用をしないとすると，ψ_1 は次のような電磁ベクトル・ポテンシャルと相互作用するものと見なせる：

$$A_\mu = \frac{\hbar c}{e} a_\mu . \tag{2.17}$$

この a_μ は式 (2.17) を通じて次のような電場 $\vec{E}$ と磁場 $\vec{B}$ に対応する：

$$\mathrm{rot} \vec{A} = \vec{B}, \quad -\vec{\nabla} A_0 - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \vec{E}. \tag{2.18}$$

あるいは，逆に次のように述べることもできる．電磁ベクトル・ポテンシャル A_μ と相互作用する波動関数 ψ_1 を求めるという問題があるとする．このとき，A_μ から式 (2.17) と (2.4) を通じて計算できる位相 γ を ψ_1 に付け加えて，新しい波動関数 ψ を $\psi = e^{i\gamma}\psi_1$ と定義する．この波動関数 ψ は電磁ベクトル・ポテンシャルがない場合の問題の解であり，この問題が解ければ，電磁場のある場合も解けるということになる．さらに言い換えれば，Schrödinger 波動関数に対する電磁場の効果は非可積分位相のみに現れる，というふうに述べることもできる．

2-2 節　多重連結領域における波動関数の位相

ここで，前節の条件 1 を満たさない場合の簡単な例を 1 つ見ておこう．円周上 $(0 \leqq \theta < 2\pi)$ で次の Schrödinger 方程式を調べる：

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{d}{d\theta}\right)^2 \psi(\theta) = E\psi(\theta).$$

境界条件として

$$\psi(2\pi) = e^{-2\pi i A}\psi(0)$$

を要求して，実数 θ の全範囲で波動関数を考える．ここで A は定数である．この問題は離散的な固有値

$$E_n = \frac{1}{2}(n-A)^2, \quad n = \text{整数}$$

を持ち，対応する固有関数は次のようになる：

$$\phi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(n-A)\theta}.$$

さて，この波動関数は非可積分の位相を持つ．円周上を 1 周すると $2\pi A$ (mod 2π) の位相変化が生じるので，$\phi_n(\theta)$ は円周上で 1 価関数ではない．しかし，非可積分の位相 γ を

$$\gamma(\theta) = -\int_0^\theta A\, d\theta' = -A\theta$$

と定義して，前節のように $\phi_n(\theta)$ から分離すると，つまり

$$\phi_n(\theta) = e^{i\gamma}\phi_{1n}(\theta),$$

とすると，

$$\phi_{1n}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\theta}$$

となり，$\phi_{1n}(\theta)$ は円周上で確定した位相を持つことになる．この新しい波動関数 $\phi_{1n}(\theta)$ は次の Schrödinger 方程式を満たす：

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{d}{d\theta} - iA\right)^2 \psi(\theta) = E\psi(\theta). \tag{2.19}$$

境界条件は

$$\psi(2\pi) = \psi(0)$$

である．固有値は変化せず

$$E_{1n} = \frac{1}{2}(n - A)^2$$

である．

ところで，この新しい波動方程式は次のような電磁ベクトル・ポテンシャルのもとでの Schrödinger 方程式であると解釈できる：

$$\vec{A} = (-Ay, Ax, 0).$$

ここでは，今考えている円周が存在する平面を x-y 平面とし，その原点を円の中心とした．このとき，

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = (0, 0, 2A)$$

となり，一様な磁場が x-y 平面に垂直に働いていることになる．非可積分の位相 γ は円周上の 1 周に対して

$$\gamma(2\pi) = -2\pi A$$

であり，この絶対値はちょうど円の内部を通過する全磁束に等しい．

この例は，前節の条件 1 が成り立たない場合でも，前節の結論［波動関数 ψ から非可積分位相 γ を分離した残りの部分 ψ_1 は 1 価関数であり，電磁場の存在下での状況を記述する］がそのまま成立する，という例である．しかし，以下の 3-5 節で示すように，条件 1 が不成立の場合には，電磁場が存在するときの波動関数は一般には 1 価になるとは限らない．

なお，Schrödinger 方程式 (2.19) についての詳しい分析が [3] で行われている．境界条件についての一般的な，きちんとした議論は例えば，[4] にある．

2-3 節　波動関数のゼロ点

2-1 節では，波動関数の (非可積分の) 位相について一般的な考察をした．この節では，2-1 節の条件 2 が成立しない場合を調べてみよう．ただし，条件 1 は仮定することにする．

連続な複素関数としての波動関数の位相は，連続関数でなければならない．したがって，小さな閉回路に沿ったこの位相の変化量は，小さい値となるだろう，とまずは思えるかもしれない．しかし，必ずしもそうとは限らないのである．一般に，確定した値を持つ波動関数 (例えば 2-1 節の ψ_1 のようなもの) の位相の閉回路の回りの (1 周の) 変化量は (この関数の 1 価性により) $2\pi n$ ($n =$ 整数) とならねばならない．このことから，小さな閉回路についての位相の勾配の積分の値は $2\pi n$ で $n = 0$ の場合であると，ひとまず思えるのだが，例外的な場合が存在する．そしてこの場合が重要なのである．例として，3 次元空間で極座標 (r, θ, ϕ),

$$x = r\sin\theta\ \cos\phi,$$

$$y = r\sin\theta\ \sin\phi,$$

$$z = r\cos\theta$$

を用いて，次の関数を考えてみよう．

$$\psi_1(\vec{x}, t) = f(r, t)\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{in\phi}. \tag{2.20}$$

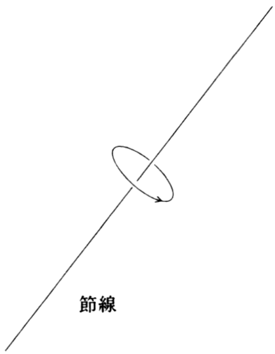


図 2-1　節線とその周りの小さい閉回路.

もちろんここで，関数 $f(r,t)$ は 1 価連続とする．この例において，$\theta=0$ の (半) 直線の回りをぐるりと 1 周すると，その閉回路がいかに小さくとも位相の変化量は

$$\int_{\phi=0}^{\phi=2\pi}\left(\frac{\partial}{\partial\phi}(n\phi)\right)d\phi=2\pi n$$

となる．$\theta=0$ のところでこの関数 (2.20) は連続であるが，このような結果が成立する．

一般的に，1 価連続の波動関数がゼロとなるところ

$$\psi_1=0 \tag{2.21}$$

では同様のことが生じうる．このような場所では，位相が定義できないので 2-1 節の条件 2 が成立しなくなっている．条件 (2.21) は波動関数 ψ_1 が複素数値なので，座標 (t,x,y,z) に対して 2 個の制限を与えることになる．時刻 t が固定されているとすると，この条件 (2.21) は一般には 3 次元空間中の 1 次元的曲線に対して満たされることになる．この曲線を節線 (nodal line) と呼ぶことにしよう．1 本の節線の周りを囲む十分小さい閉回路に沿って，波動関数 ψ_1 の位相 (これを以下 δ と書くことにしよう) が 1 周の間に変化する値は

$$\oint\vec{\nabla}\delta\cdot d\vec{s}=2\pi n,\quad n=(\text{必ずしも 0 とは限らない})\text{ 整数} \tag{2.22}$$

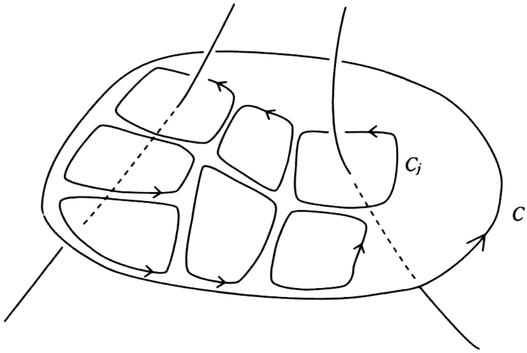


図 2-2 複数個の節線とその周りの閉回路 C．大きな閉回路 C は小さな閉回路 C_j の合併に帰着できる．S は C を境界とし，かつ C_j を含む曲面である．

となる．ところで，式 (2.22) の値を決める n という量は，この節線に特徴的な量であり (これを指数と呼ぼう)，その符号はこの節線とそれを囲む閉曲線の相対的な位置関係で決まる (図 2-1)．

さてここで，元の波動関数 ψ の位相 $(\delta+\gamma)$ が，ある有限の大きさの閉回路 C に沿ってどれだけ変化するか見てみよう．このような閉回路は，多数 (k 個としよう) の小さな閉回路 C_j の合併と見なすことができる．そして，小さな閉回路はそれぞれ多くて 1 本の節線を囲んでいるとする．それぞれの小閉回路 C_j が囲む節線の指数を n_j とする．小閉回路 C_j が節線を囲んでいなければ $n_j=0$ とする．閉回路 C を境界とする曲面を S とする (図 2-2)．

このとき，位相 $(\delta+\gamma)$ の変化量は，

$$\oint_C \vec{\nabla}(\delta+\gamma)\cdot d\vec{s} = \sum_{j=1}^{k}\left(\oint_{C_j}\vec{\nabla}\delta\cdot d\vec{s}\right) + \oint_C(-\vec{a})\cdot d\vec{s}$$

$$= \sum_{j=1}^{k} 2\pi n_j - \iint_S (\vec{\nabla}\times\vec{a})\cdot d\vec{S} \qquad (2.23)$$

と表される．記号は前節と同様であり，例えば，γ の勾配は式 (2.4) により a_μ と書く．ここで次のことに注意する：

$$\vec{a} = (a^1, a^2, a^3) = -(a_1, a_2, a_3).$$

2 行目の後半では Stokes の定理を適用した．さてここで，非可積分の位相 γ を電磁場と関係づける前節の結果 (2.18) を代入すると，次のようになる．

$$\oint_C \vec{\nabla}(\delta+\gamma)\cdot d\vec{s} = \sum_{j=1}^{k} 2\pi n_j - \iint_S \left(\frac{e}{\hbar c}\right)\vec{B}\cdot d\vec{S}$$
$$= 2\pi N - \left(\frac{e}{\hbar c}\right)\Phi. \tag{2.24}$$

2 行目では，n_j の総和を N と書き，曲面 S を突き抜ける全磁束を Φ と書いた．

この結果の式 (2.24) は曲線 C を境界とする曲面 S に対するものである．この式で，曲面 S を閉曲面とすると，この左辺の値は 0 でなければならない．閉曲面は境界を持たないので，位相変化を考えるべき閉曲線は存在せず，したがって当然位相変化量は 0 である．あるいは，式 (2.24) において，曲面 S を全体としては小さく縮めることなしに，S の境界となる閉曲線 C をどんどん小さくしていき，最後に点にしてしまう，と考えてもよい．ただし，この最後に C が収縮していった先の点は，どの節線上にもないようにしておく．このとき，この収縮のプロセスから理解できるように，位相変化は 0 になる．つまり，

$$2\pi N - \left(\frac{e}{\hbar c}\right)\Phi = 0, \quad \text{閉曲面 } S \text{ について．} \tag{2.25}$$

ここで，Φ は閉曲面 S を貫く全磁束であり，N は閉曲面 S についての n_j の総和である．節線が閉曲面 S 全体を通過している場合には，この節線が閉曲面 S に侵入するところと脱出するところで，n_j は逆符号となり，この節線の N に対する 2 つの寄与は相殺する．つまり，N に対する寄与は，閉曲面 S の内部に端点を持つ節線からくる．Φ についても同様である．

全磁束 Φ は粒子にとって外的な磁場によるものであるから，式 (2.25) が成立するということは，N がすべての波動関数に対して共通のものである，ということを意味する．つまり，節線の端点は電磁場の特異点に対応していることになる (図 2-3)．

次節で，さらに詳しく式 (2.25) の意味を考察しよう．

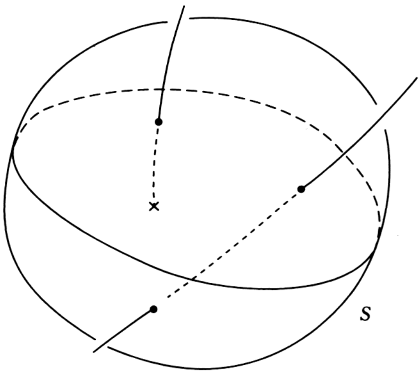


図 **2-3**　閉曲面 S を通過する節線と内部に端点をもつ節線.

2-4 節　磁気単極子と電荷の量子化

前節の結論の式 (2.25) において，閉曲面 S を十分小さくとり，その内部に含まれる電磁場の特異点が 1 つだけであるとしよう．今，ここでは，磁場だけが関係している．この特異点の座標を原点に採ることにして，

$$\vec{E} = 0, \quad \vec{B} = g\frac{\vec{r}}{r^3} \tag{2.26}$$

という場合を考えると，

$$\int \vec{B} \cdot d\vec{S} = \int g\frac{\vec{r}}{r^3} \cdot d\vec{S} = \int g\frac{1}{r^2} r^2\, d\Omega = \underset{\sim}{4\pi g} \tag{2.27}$$

となる．式 (2.26) の磁場 $\vec{B}$ の特異性の強さ g は，磁気単極子 (今の場合原点に存在する) の磁荷と呼ばれる量である．

式 (2.27) を (2.25) へ代入すると，

$$\frac{4\pi eg}{\hbar c} = 2\pi N, \tag{2.28}$$

すなわち，

$$g = \frac{N}{2} \cdot \frac{\hbar c}{e} \tag{2.29}$$

となる．したがって，このような理論では，(孤立した) 磁気単極子の導入が可能だが，どのような磁荷でもよいわけではない．磁荷は式 (2.29) が示すように，

$$\frac{\hbar c}{2e}$$

の整数倍でなくてはならない．

あるいは，逆に式 (2.28) を次のように書くと，

$$e = \frac{N}{2} \cdot \frac{\hbar c}{g}. \tag{2.30}$$

今度は，電荷が

$$\frac{\hbar c}{2g}$$

の整数倍でなくてはならない．この世界に存在する磁荷の種類が有限とすると［このような磁荷にしても，式 (2.29) の制限があるので，任意という訳にはいかないが］，条件 (2.30) から，電荷には最小の単位があって，すべての電荷はこの単位の整数倍でなくてはならないことになる．

この電荷の量子化という結論は，1931 年に Dirac によって初めて示された [2]．

* * * * * * *

もう少し詳しく，条件 (2.28) から電荷の量子化が導かれる状況を見ておこう．K 個の異なる電荷 $e_1, e_2, e_3, \cdots, e_K$ と L 個の異なる磁荷 $g_1, g_2, g_3, \cdots, g_L$ があるとする．このとき，条件 (2.28) を次のように書く ($\hbar = c = 1$ とする)．

$$e_i g_j = \frac{1}{2} n_{ij}, \quad i = 1, 2, 3, \cdots, K, \; j = 1, 2, 3, \cdots, L. \tag{2.31}$$

さてここで，K 個の整数 n_{ij} ($i = 1, 2, 3, \cdots, K$, j は固定) の最大公約数を n_{0j} と書くことにする．この最大公約数は，もとの整数の集合の (整数係数の) 1 次結合で書ける．

$$n_{0j} = \sum_{i=1}^{K} a_{ij} n_{ij}, \quad a_{ij} \text{ は整数}. \tag{2.32}$$

当然，もとの整数 n_{ij} は最大公約数 n_{0j} の整数倍である．

$$n_{ij} = b_{ij} \cdot n_{0j}, \quad b_{ij} \text{ は整数}. \tag{2.33}$$

したがって，電荷 e_i は次のように表現できる．

$$e_i = \frac{n_{ij}}{2g_j} = \frac{b_{ij} n_{0j}}{2g_j}. \tag{2.34}$$

ここで，

$$e_{0j} = \frac{n_{0j}}{2g_j} \tag{2.35}$$

と定義する．式 (2.34) は次のように書ける：

$$e_i = b_{ij} \cdot e_{0j}. \tag{2.36}$$

次に，e_{0j} の絶対値の大きさは j の値に依存しない数であることを示そう．まず，定義 (2.35) および (2.32) と (2.34) をこの順に用いると，

$$e_{0j} = \frac{n_{0j}}{2g_j} = \frac{\sum_{i=1}^{K} a_{ij} n_{ij}}{2g_j} = \sum_{i=1}^{K} a_{ij} \left(\frac{n_{ij}}{2g_j} \right) = \sum_{i=1}^{K} a_{ij} e_i \tag{2.37}$$

となる．ここへ，条件 (2.31) を

$$e_i = \frac{n_{il}}{2g_l}, \quad l \neq j$$

として式 (2.37) へ代入する．ついで，式 (3.33) を用いると，

$$e_{0j} = \sum_{i=1}^{K} a_{ij} \left(\frac{n_{il}}{2g_l} \right) = \sum_{i=1}^{K} a_{ij} \left(\frac{b_{il} n_{0l}}{2g_l} \right) \tag{2.38}$$

である．再び定義 (2.35) を用いると，

$$e_{0j} = \left(\sum_{i=1}^{K} a_{ij} b_{il} \right) e_{0l} \tag{2.39}$$

という結論が得られる．つまり，集合

$$\{e_{0l} \ : \ j = 1, 2, 3, \cdots, L\} \tag{2.40}$$

の任意の 2 つの要素を持ってくると，一方が他方の整数倍になっている．例えば，

$$e_{0j} = ce_{0l},\ e_{0l} = de_{0j}, \quad c, d \text{ は整数} \tag{2.41}$$

であり，これから

$$e_{0j} = cde_{0j},$$

つまり，

$$cd = 1$$

となる．この式は

$$c = d = 1, \quad \text{または} \quad c = d = -1 \tag{2.42}$$

を意味する．

したがって，集合 (2.40) の要素の絶対値はすべて等しい．これを e_0 と書こう．そうすると，式 (2.36) から，すべての電荷が e_0 の整数倍であるという結論が得られる．

* * * * * * *

2-5 節　磁気単極子場の中を運動する荷電粒子の波動関数

2-1 節で波動関数 ψ から非可積分位相 γ を分離して

$$\psi = \psi_1 e^{i\gamma}$$

と書いた．そして，ψ が方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{1}{2m}(\vec{\nabla})^2\psi + V\psi \tag{2.43}$$

を満たすならば，1 価で確定した値を持つ波動関数 ψ_1 は次の方程式を満たすことを見た．

$$i\left(\frac{\partial}{\partial t} + ieA_0\right)\psi_1 = -\frac{1}{2m}(\vec{\nabla} - ie\vec{A})^2\psi_1 + V\psi_1. \tag{2.44}$$

この節および以下では，前節後半に引き続き，特に必要がない限り $\hbar$ と c は 1 とする．このとき，例えば，電荷 (と磁荷) の量子化の条件は，式 (2.31) のように，

$$eg = 0, \pm\frac{1}{2}, \pm 1, \cdots \tag{2.45}$$

となっている．

原点に点状の電荷 e が存在するときの電場と磁場は

$$\vec{E} = e\frac{\vec{r}}{4\pi r^3}, \quad \vec{B} = 0$$

である．原点に点状の磁荷 g が存在したとすると，この場合の電場と磁場は

$$\vec{E} = 0, \quad \vec{B} = g\frac{\vec{r}}{r^3} \tag{2.46}$$

となる．磁荷 g は 2-4 節の式 (2.26) でこのように定義した．この節では，方程式 (2.44) をこの磁気単極子の場 (2.46) に対して考えてみよう．方程式 (2.44) にはベクトル・ポテンシャル $\vec{A}$ の形で電磁場が入っている．今の場合，磁場だけしか存在せず，$A_0 = 0$ である．そこで，場 (2.46) に対応するベクトル・ポテンシャルを求めよう．

* * * * * * *

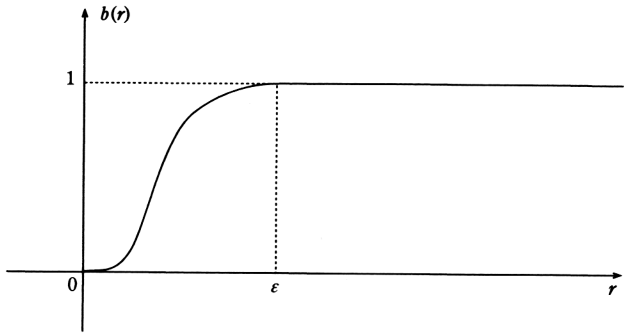


図 2-4　$\varepsilon \leqq r$ のところで，(2.47) の $\vec{B}$ と (2.46) の $\vec{B}$ は同一の振る舞いを示す．

この磁場 $\vec{B}$ の原点での特異性は，以下で考察する問題にとって本質的ではない．この特異性は原点に点状の磁気単極子があるとしたためである．点状ではなくて，原点付近に広がった磁気単極子が存在してもよい．この場合でも，原点から十分離れたところでは，磁場は式 (2.46) になる．例えば，

$$\vec{B} = g\frac{b(r)\vec{r}}{r^3} \tag{2.47}$$

とし，関数 $b(r)$ は図 2-4 のように原点近傍以外は 1 で，そこから原点へ向かって十分滑らかに 0 に近づくとしておけばよい．このようにして，原点で特異性がなく，遠方で式 (2.46) のように振る舞う磁場が作れる．

表式 (2.47) の場合でも，

$$\iint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = \iiint_V (\vec{\nabla} \cdot \vec{B})\, dV = 4\pi g \tag{2.48}$$

となる．ここで，V と S は原点を含む十分大きな領域とその表面である．以下では必要に応じて，磁場 (2.46) はこのように特異性のない表現 (2.47) に読み替えることにする．要は，式 (2.46) の原点での特異性は，以下の議論に関しては重要な問題でないということである．

*　*　*　*　*　*　*

さて，場 (2.46) を再現するベクトル・ポテンシャル $\vec{A}$ で (原点以外の点で) 特異性のないものは存在しない．なぜならば，定義により

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

であるから，特異性のない $\vec{A}$ に対しては常に

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = 0$$

となり，磁場の発散の積分が $4\pi g$ とはなりえないからである．

あるいは，次のようにしても同じ結論が得られる (θ を天頂角，ϕ を方位角とする)．ある一定の t, r, θ に対して，次の閉路積分を考える．

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{s}.$$

一定の t, r, θ に対して ϕ が 0 から 2π まで動く閉回路を C とする．この C を境界とする曲面 (半径 r の球面の天頂角が 0 から θ までの部分) を S で表す．このとき，

$$\begin{aligned}\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{s} &= \int_S (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot d\vec{S} = \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} \\ &= \int_0^{\theta} r^2 \sin\theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi \frac{g}{r^2} \\ &= 2\pi g(1 - \cos\theta) \end{aligned} \tag{2.49}$$

となる．この積分値は $\theta = 0$ のとき 0 で，$\theta = \pi$ のとき $4\pi g$ となる．しかし，$\theta = \pi$ のときの閉路積分は 1 点に収縮しているので，$\vec{A}$ に特異性がなければ，0 である．したがって，($r = 0$ 以外のところで) 特異性を持たない $\vec{A}$ は磁気単極子場 (2.46) を再現できないと結論できる．

ベクトル・ポテンシャル $\vec{A}$ に特異性を許すと，例えば次のものが単極子場 (2.46) を再現する．

$$A_x = -\frac{gy}{r(r+z)}, \quad A_y = \frac{gx}{r(r+z)}, \quad A_z = 0. \tag{2.50}$$

このポテンシャルは，負の z 軸上に特異性を持っている．極座標 (r, θ, ϕ) での表現へ変換すると，

$$\vec{A}\cdot d\vec{x} = g(1-\cos\theta)\,d\phi \tag{2.51}$$

となる．したがって，

$$A_\phi = g(1-\cos\theta)$$

であり，場の強さは

$$F_{\theta\phi} = \partial_\theta A_\phi - \partial_\phi A_\theta = g\sin\theta$$

となり

$$F_{\theta\phi}\,d\theta d\phi = \frac{g}{r^2} r^2 \sin\theta\; d\theta d\phi$$

である．このようにしても磁場が (2.46) となることが確かめられる．波動関数 ψ の非可積分の位相の変化は

$$\int (-e)\vec{A}\cdot d\vec{x} = (-eg)\int (1-\cos\theta)\,d\phi \tag{2.52}$$

である．

さて，Schrödinger 方程式 (2.44) に，このベクトル・ポテンシャル (2.50) を用いて，変数分離する．波動関数を

$$\psi_1(t,r,\theta,\phi) = e^{-iEt} f(r) F(\theta,\phi)$$

と書く．このとき，角度依存部分の方程式は

$$\begin{aligned} M(\theta,\phi) \equiv\ & \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \\ & -(eg)\sec^2\left(\frac{\theta}{2}\right) i\frac{\partial}{\partial\phi} - (eg)^2\tan^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned}$$

とおくと，

$$M(\theta,\phi)\ F(\theta,\phi) = -\lambda F(\theta,\phi) \tag{2.53}$$

となり，動径部分の方程式は

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\lambda}{r^2}+V(r)\right)f(r)=-2mEf(r)$$

となる．$eg=1/2$ の場合，角度依存部分 $F(\theta,\phi)$ に対する解としては，例えば，

$$F_A(\theta,\phi)=\cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \tag{2.54A}$$

$$F_B(\theta,\phi)=\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\phi} \tag{2.54B}$$

がある．これらが固有値 $\lambda=1/2$ に属する解であることは，これらを方程式へ直接代入することによって確かめられる．今の場合 (線状に) 特異性のあるベクトル・ポテンシャルを用いているので，これまでの議論がどこまで成立するか，疑問が残るが，とりあえず様子を見てみることにする．また F_B は，ψ_1 に対する 2-1 節の連続性の要請を満たしていないが，この関数が不連続になる場所はポテンシャルの特異点でもあるので，直ちにこれを排除することはやめておこう．

まず始めに，いずれの解も節線を持ち，その端点は原点であることがすぐにわかる．解 ψ_{1A} は負の z 軸上でゼロとなり，その近傍で連続である．一方，$\exp(i\gamma)$ の方は，負の z 軸上で $\exp(-i\phi+\mathrm{const})$ となる．つまり，波動関数 ψ はここでゼロで，非可積分の位相を含む部分は $\exp(-i\phi)$ である．したがって，原点から外へ向かう方向で負の z 軸を (正の向きに) 一周すると ψ の位相は 2π 変化する．他方，解 ψ_{1B} は負の z 軸上で不連続である．しかし，この不連続性は $\exp(i\gamma)$ の不連続性と打ち消し合う．結局この場合，波動関数 ψ は，正の z 軸上でゼロであり，その付近で位相は $\exp(i\phi)$ である．したがって，原点から外へ向かう方向で正の z 軸を (正の向きに) 一周すると，波動関数 ψ の位相は 2π 変化する．

これらのどちらの場合も，波動関数 ψ は連続関数であり，同一の性質の節線を持っている．つまり，磁場中の波動関数 ψ_1 の方から見ると

$$\psi_1=e^{-i\gamma}\cdot\psi$$

であるから，上の 2 つの場合のどちらも，同一の電磁ベクトル・ポテンシャルで決まる部分 $\exp(-i\gamma)$ と節線を持つ連続関数 ψ の積になる．このように，節線の場所は波動関数によって一般に異なるが，2-3 節の関係式 (2.25) の方は背景の電磁場によって決定され，個々の波動関数に依存しないことが具体的に確認できた．

なお，方程式 (2.53) の解が [5] において詳しく調べられていることを付け加えておこう．

2-6 節　ゲージ不変性

前節で考察した波動方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{1}{2m}(\vec{\nabla} - ie\vec{A})^2\psi + V\psi \tag{2.55}$$

は，次の変換で不変である．

$$\begin{aligned} &\psi \longrightarrow \psi' = e^{-ie\chi}\psi, \\ &\vec{A} \longrightarrow \vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla}\chi = \vec{A} - \frac{i}{e}e^{ie\chi}\vec{\nabla}(e^{-ie\chi}). \end{aligned} \tag{2.56}$$

この変換はゲージ変換と呼ばれている．ここで，関数 χ は時間に依存しないとする［この節以下では，ψ_1 の下添字 1 を取り去ることにする］．このゲージ変換のもとで，磁場の強さ $\vec{B}$ は不変である．なお，もう少し一般的なゲージ変換

$$\begin{aligned} &\psi \longrightarrow \psi' = e^{-ie\chi}\psi, \\ &A_\mu \longrightarrow A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu\chi, \quad \mu = 0, 1, 2, 3 \end{aligned} \tag{2.57}$$

のもとで，方程式 (2.44) は不変となる．このときも，電磁場の強さ $F_{\mu\nu}$ は不変である．勾配の回転はゼロとなるからである．

さて，式 (2.56) において

$$\chi = 2g\phi \tag{2.58}$$

とすると，

$$\vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla}(2g\phi)$$

であるから，

$$(\vec{A} - \vec{A}') \cdot d\vec{x} = 2g\, d\phi$$

となる．つまり，式 (2.51) を用いて，

$$\vec{A}' \cdot d\vec{x} = -g(1 + \cos\theta)\, d\phi \tag{2.59}$$

という表現が求まる．これを直交座標系の表式に書き直すと，次のようになる．

$$A'_x = \frac{gy}{r(r-z)}, \quad A'_y = -\frac{gx}{r(r-z)}, \quad A'_z = 0. \tag{2.60}$$

したがって，ゲージ変換 (2.56) に (2.58) を用いると，ベクトル・ポテンシャルの特異な場所が負の z 軸から正の z 軸へ移動する．観測可能な物理量はゲージ変換のもとで不変であるから［そして，特に今の場合についていうと，ベクトル・ポテンシャル自身は観測可能量ではなくて，その回転つまり磁場 $\vec{B}$ が観測可能で，この磁場は (原点以外で) 特異点を持たないので］，ベクトル・ポテンシャルの特異性は人工的なものである．さらに今の場合，ゲージ変換自身も特異なものとなっている．

さて，ベクトル・ポテンシャル (2.60) を採用した場合には，波動関数の角度依存部分 $F(\theta,\phi)'$ が満たす方程式は

$$M'(\theta,\phi) \equiv \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + (eg)\mathrm{cosec}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) i\frac{\partial}{\partial\phi} - (eg)^2\cot^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

とおいたとき，

$$M'(\theta,\phi)F'(\theta,\phi) = -\lambda F'(\theta,\phi)$$

となる．動径部分の波動関数は以前と同一の方程式を満たす．2-5 節と同様に $eg = 1/2$ の場合，角度依存部分 $F'(\theta,\phi)$ に対する解としては，例えば，

$$F'_A(\theta,\phi) = e^{-i\phi}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \tag{2.54A$'$}$$

$$F'_B(\theta,\phi) = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{2.54B$'$}$$

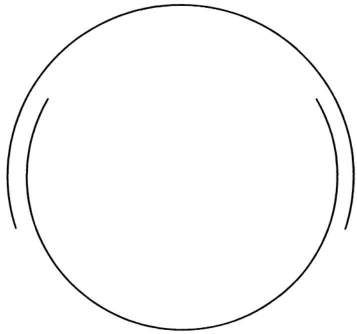


図 2-5　「北半球」と「南半球」.

がある．これらが固有値 $\lambda = 1/2$ に属する解であることは，これらを方程式へ直接代入することによって確かめられる．

ところで，物理的には存在しない特異性に常に付きまとわれながら理論を考えていく，ということは場合によっては大変不便なことである．そこで，次のように考えよう．今，この問題に関しては角度 θ と ϕ だけが重要な役割を演ずるので，図 2-5 のような半径 r の球面上で考察を進めよう (t は任意に固定しておく)．

図 2-5 の球面において $z > -r/2$ の領域を「北半球」と呼び，$r/2 > z$ の領域を「南半球」と呼ぼう．さて，式 (2.50) のベクトル・ポテンシャル $\vec{A}$ は「北半球」では特異点を持たないので，方程式 (2.55) にこの $\vec{A}$ を用いて波動関数 ψ をこの領域の範囲内だけで解く．他方，式 (2.60) のベクトル・ポテンシャル $\vec{A}'$ は「南半球」で特異点を持たないから，この $\vec{A}'$ を用いて「南半球」だけで波動方程式を解き，その解を ψ' とする．ただし,「北半球」と「南半球」の重なっている領域では,

$$\psi' = e^{-2ieg\phi}\psi \tag{2.61}$$

という条件を満たすものだけを求める．

条件 (2.61) はちょうどベクトル・ポテンシャル $\vec{A}$ と $\vec{A}'$ の間のゲージ変換に対応するものになっている［式 (2.58) と (2.56)］．そのように選んだのである．このとき，式 (2.54A) と (2.54A′)，式 (2.54B) と (2.54B′) がそれぞ

れ対応している．さてこのような解の組 $((\vec{A},\psi),(\vec{A}',\psi'))$ は，全空間での正当な解と見なし得るものである．$(\vec{A},\psi)$ は「北半球」ではもちろん正当な解であり，他方 $(\vec{A}',\psi')$ は「南半球」での正当な解で，２つの領域の重なる場所では $(\vec{A},\psi)$ と $(\vec{A}',\psi')$ はゲージ変換で互いに移り変われるものだから物理的に同じものである．つまりこの組は全体としてただ１つの物理的状態を表現する解となっている．しかも，この場合非物理的な特異性は現れない．

この状況は次の事態と類似している．すなわち，現実の地球の「北半球」および「南半球」に対して別々には，１枚の紙に連続的な地理的地図が作成可能である．しかし，地球全体に対する連続的な１枚の地図は作れない．地球儀の表面がゴムでできていても，この表面のゴムを破ることなしには１枚の平面上に広げることはできないからである．一方,「北半球」と「南半球」に対してそれぞれ１枚の地図があれば，たとえそれらの縮尺や図法が異なっていても，赤道領域で両者の対応をつければ，実際上正確な判断が可能となる．つまりこの２組で１つの地球が再現されるわけである．これでよしとせねばならないだろう．

同様に，物理上の問題の状況によっては，いくつかの波動関数の１組でもって１つの状態を表現する，ということも起こり得るわけである．このような状況に対応した数学的形式として，ファイバー束の理論がある．これを次節で解説する．きっちりと勉強したい人は，例えば [6] を見るとよいだろう．

なお，条件式 (2.61) において波動関数 ψ,ψ' がともに一価連続関数とすると，

$$e^{-2ieg\phi} \tag{2.62}$$

は一価関数でなければならない．つまり，ϕ が 2π 増加しても式 (2.62) の関数値は不変でなくてはならない．この要請から

$$2eg = \text{整数}$$

という Dirac の条件が導かれる．すなわち，物理的に意味のある特異性以外を認めない上のような理論形式においても，きちんと Dirac の電荷の量子化条件が結論されるのである．

ファイバー束の理論が物理学のこの分野において重要な役割を演ずる，ということをはっきり示した論文としては [7] がよく知られている．なお，磁気単極子に関する総合報告としては例えば [8] がある．

第 3 章

ファイバー束

3-1 節　ファイバー束の「定義」

通常の Schrödinger の波動関数 ψ は，座標 x に対してある複素数値 $\psi(x)$ を対応させる関数である．$x_0\ (=t)$，x_1，x_2，x_3 等をまとめて x と書く．この x の住んでいる空間を M とする．$x \in M$ である．また，スピンの自由度等があれば ψ は複素数の成分を幾つか持つことになるが，ここでは話を簡単にするために単に 1 つの複素数とする．複素数全体を $\mathbb{C}$ と書くことにする．$\psi(x) \in \mathbb{C}$ である．

これを図式化すると，図 3-1 のように空間 M の各点に $\mathbb{C}$ のファイバーが立っていて，我々の波動関数 $\psi(x)$ は x 上のファイバーの 1 点に対応していると思うことができる．そうすると，我々の対象とする空間は直積空間 $M \times \mathbb{C}$ となる．この場合には，1 枚の地図 M があればそれで十分である．この状況設定のもとでは，ψ は各ファイバーを 1 点だけで横切る $M \times \mathbb{C}$ の 1 つの切断面 (あるいは，切断) ［cross section，または単に section］となる．

前節で，磁気単極子場中の荷電粒子の運動に関して，非物理的な特異性を許さない理論形式を見た．このとき，我々の全空間は単純な直積空間では表現できない．少なくとも 2 枚の地図が必要となる．しかしこの場合でも，(M と $\mathbb{C}$ の) 全体の空間は，局所的には配位空間 M の部分集合 (「北半球」と「南半球」) と $\mathbb{C}$ の直積になっている．つまり，部分的には直積空間となって

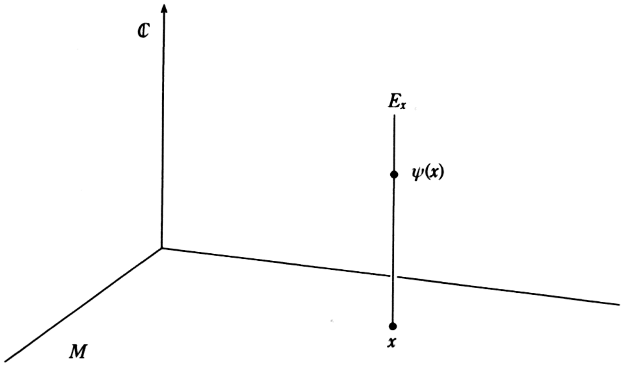


図 3-1　E_x は x 上のファイバーである．Schrödinger の波動関数 $\psi(x)$ は，ファイバー束 $M \times \mathbb{C}$ の一つの切断面である．

いるものを上手に張り合わせたものである (上手にという意味は，重なる部分が整合的になる，つまり，ゲージ変換で相互の部分の翻訳がきちんとできるということである).

ファイバー束 (fiber bundle) とは，直積空間をこのように一般化したものであり，例えば次のように定義できる．

ファイバー束は (E, π, F, G, M) の組として特徴づけられる．ここで，以下の条件が課されているものとする．

1. E は多様体であり，ファイバー束の全空間である (多様体とは，座標をうまく導入できる空間ということである).
2. M はファイバー束の底空間で，これも多様体である．
3. 各点 $x \in M$ に対して，x 上のファイバー E_x があり，E_x のすべての点は射影 π によって底空間の 1 点 x へ写される．式で書くと次のようになる：

$$\pi(E_x) = x, \quad E_x = \pi^{-1}(x).$$

4. E は局所的には底空間 M とファイバー F (これも多様体) の直積空間となる．すなわち，任意の 1 点 $x \in M$ に対してその適切な近傍 U (地図) をとると $\pi^{-1}(U)$ と $U \times F$ が同型となっている．つまり，適切な座標を導入すると同一のものと見なせるということである．具体的には，

同型写像 $\varphi : \pi^{-1}(U) \longrightarrow U \times F$ があり，特に $\varphi(x)$ を φ_x と書くことにすると，$\varphi_x : E_x \longrightarrow \{x\} \times F$ で，φ_x が E_x 上の各点の座標を与える．$p \in E_x$ に対して $\varphi_x(p) = (x, \phi_x(p))$ と書こう．$\phi_x(p)$ が点 $p \in E_x$ のファイバー上での座標である．

5. 底空間 M を覆う近傍系 (地図の集合，すなわち地図帳) $\{U_\alpha\}$ に対して，次のことが成立する．$x \in U_\alpha \cap U_\beta$ に対して，地図 U_α 上でのファイバー E_x の座標 $\phi_{\alpha x}$ と地図 U_β 上での E_x の座標 $\phi_{\beta x}$ の間の対応が

$$\phi_{\alpha x} = t_{\alpha\beta}(x)\phi_{\beta x}, \quad t_{\alpha\beta}(x) \in G$$

で与えられる．このとき，$t_{\alpha\beta}(x) = \phi_{\alpha x} \circ \phi_{\beta x}^{-1}$ は F から F への写像であり，これは F の同型写像となる ($t_{\alpha\beta}$ は転移関数，変換関数，座標変換等と呼ばれる)．この地図間の翻訳ルールは，次の整合性の条件を満たす．

$$x \in U_\alpha \cap U_\beta \cap U_\gamma \text{ に対して，} \quad t_{\alpha\beta}(x) \circ t_{\beta\gamma}(x) = t_{\alpha\gamma}(x).$$

G は F の同型群であり，ファイバー束 E の構造群と呼ばれる［ここでも以下でも，座標，射影，写像，同型等はすべて性質のよいものであるとする．つまり，物理学で問題となる場合にはだいたいにおいて，対象とする空間にはすでに適切な座標が入っているので，これらの空間を多様体として取り扱う．そして，これらの座標に関して何度でも微分ができるような写像等々だけを想定している］．

特に，主ファイバー束 P と呼ばれるものがあり，これは (P, π, G, M) の組として与えられる．主ファイバー束とはファイバー束であって，かつファイバーが構造群自身の場合である．このとき G は Lie 群とする (群 G が Lie 群とは，G が多様体でかつ群であり，さらに群の演算が多様体から多様体への写像でもあるので，これが座標によって微分可能というものである)．さらに，次の条件が満たされているとする．群の演算はファイバー上の点を垂直方向にのみ移動させ，これが座標のとり方と素直に整合する (垂直方向の移動とは単に，同一ファイバー内での移動ということである)．さらに，ファイバー上の任意の 2 点は必ず群 G の作用で一意的に移りかわれる (効果的に働く) とする．

具体的には次のようになっている．ファイバー束 P に対して群 G は右から作用し，$p \in P, g \in G$ としたとき $\pi(pg) = \pi(p)$ [$= x$ とおく] であり $\phi_x(pg) = \phi_x(p)g$ となる．また，$\pi(p) = \pi(p')$ ならば $p' = pg$ となる G の元 g がただ 1 つ存在する．

3-2 節　水平方向，つまり接続の「定義」

前節でファイバー束がどのようなものであるかを見た．また，波動関数 ψ がファイバー束の切断面としてとらえられることにもふれた．一般に，ファイバー束の切断面 σ とは，底空間 M からバンドル空間 E への写像であり，$\pi(\sigma(x)) = x$，$x \in M$ となるものである．言い換えれば，M の各点 x に対して，x 上のファイバー E_x の 1 点 $\sigma(x)$ を対応させる写像である．もちろん，切断面 σ は局所的には各地図 $U_\alpha \subset M$ 上で決定できるもので，これを σ_α と書く．このとき，σ_α は U_α から E への写像で $\pi(\sigma_\alpha(x)) = x$，$x \in U_\alpha$ である．

一般的にファイバーとしては，前節の条件を満たすものならば何でもよいわけだが，よく用いられる例は，ベクトル束 (vector bundle) である．ファイバーがベクトル空間であるファイバー束をベクトル束という．このさらに特殊例が接ベクトル束 (tangent bundle) で，この場合は，M の各点 x における M の接線ベクトル (接ベクトル) の全体 (接空間) がファイバーとなる．

さて，各点 x に対して，その上のファイバー E_x に沿う方向を垂直と以前にいった．では，水平方向はどうか．底空間 M 上を x が動くとき，この方向を水平と呼ぶのが妥当である．では，ファイバー空間 E 全体での水平方向はどうか．E_x 上のある点からその隣の $E_{x+\Delta x}$ 上のどの点に移動するのが水平方向か．これは今までの定義だけからでは決定できない．なぜならば，各 E_x 上の座標のとり方が任意だからである (もちろん，隣近所の E_x たちの座標は互いに滑らかにつながっていなければならないが)．図 3-2 に大ざっぱな状況を示す．

図 3-2 では，各ファイバーの原点を黒丸で示した．図 3-2a で単純に水平方向を定義して点線の直線で示した．この直線は図 3-2b (これは図 3-2a と等価である) では曲がって見える．つまり，ファイバー空間 E の中での水平方向は予め決まっているものではなく，新たに定義しなければならないもので

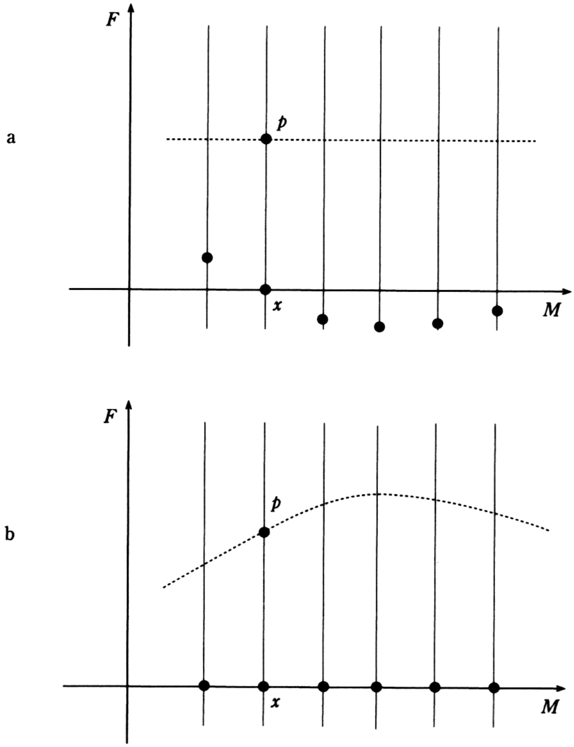


図 3-2　a: 黒丸はファイバー E_x 等の座標原点を表す．点線が水平方向であると仮定する．b: ファイバー E_x 等の座標の原点を M 上に揃えると，a 図の水平方向はこの図のようになる．

ある．

そこで，これを定義しよう．まず主ファイバー束 P での水平方向の定義から始めよう．

主ファイバー束 P の底空間 M 上の曲線 $C : x^\mu(t)$ (ここで t は曲線のパラメタ) を水平に保って持ち上げた P 中の曲線 $\overline{C}$ の座標を $(x^\mu(t), g(t))$ と書く (図 3-3) [もちろん，水平方向が定義されて初めて $g(t)$ が決まるのである]．ここで，Lie 群が $SU(N)$ のような行列群ならば $g(t)$ は $g_{ij}(t)$ のように添字を持つ．以下この場合を考え，添字は必要に応じて書いたり書かなかったりするが，混乱は生じないだろう．また，x^μ の添字 μ も Minkowski 空間

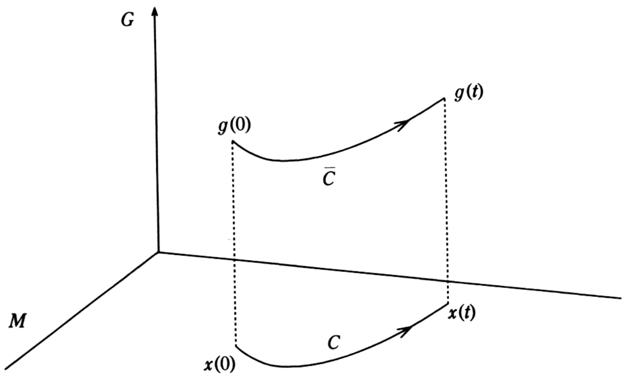


図 3-3　底空間 M 上の曲線 C を水平に保って持ち上げた曲線を $\overline{C}$ とする．

の添字 $\mu = 0, 1, 2, 3$ と限定しているわけではない．

さて，主ファイバー束 P の 1 点 (x, g) での方向の基準を決めよう．まず，x^μ が増加する方向がある．この「単位ベクトル」を

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} \tag{3.1}$$

と書く．次に，ファイバー上を垂直に動く方向がある．この「単位ベクトル」を

$$g\frac{\partial}{\partial g} \tag{3.2}$$

と書く．

*　*　*　*　*　*　*

なぜ式 (3.2) のように書くかを説明する．まず，Lie 群 G の任意の点での接ベクトル全体の集合は Lie 環 (Lie 代数) G' となることを思い出そう (Lie 代数は通常，群 G に対応する小文字 g で表すが，本書では小文字 g を群 G の要素を表すのに用いることが多いので，やむを得ず G' とした)．物理学で

よく使われる言葉で大ざっぱにいえば，次のようになる．群 G の要素 u は，G のある無限小生成元 A とあるパラメタ t によって

$$u = e^{tA}$$

と書かれる (というか，このように書ける場合を専ら考えるということである)．ここで，u を t で微分して (t の増加する) 接線方向を計算すると

$$\frac{du}{dt} = Ae^{tA} = Au \tag{3.3}$$

である．したがって，群 G の要素を 1 つ固定して，例えば単位元 u $(t=0)$，あらゆる接線方向を考えれば，G' のあらゆる要素 A が式 (3.3) の右辺に現れる．すなわち Lie 群 G の接ベクトル空間を Lie 代数 G' と同一視できる．なおここで，Lie 代数 G' の要素 A と Lie 群 G の要素 u の積 Au は，式 (3.3) の最左辺がその定義式であることに注意しておこう．

今ここでは，群 G の要素 g の関数 $f(g)$ に対し，f の g による微分を考えたい：

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}f(ge^{tA})\bigg|_{t=0} &= (gA)_{ij}\frac{\partial}{\partial g_{ij}}f(g) \\ &= A_{kj}\cdot g_{ik}\frac{\partial}{\partial g_{ij}}f(g).\end{aligned} \tag{3.4}$$

主ファイバー束の定義により，群の垂直方向への作用は右からと定義しているので $\exp(tA)$ を g の右に書く．また，同一の添字が 2 個現れているところは，その添字について和をとるものとし，$\displaystyle\sum_{\mu=0}^{3}$ 等の記号を省略する．この式 (3.4) から $g(\partial/\partial g)$ の作用が，ファイバー上を垂直に動く方向の「単位ベクトル」に相当し，A がその大きさを与えるものと解釈できる．

以上が式 (3.2) と書く根拠である．

*　*　*　*　*　*　*

さて，主ファイバー束 P の点 (x, g) での水平方向は，式 (3.1) と (3.2) の次のような 1 次結合と定義する：

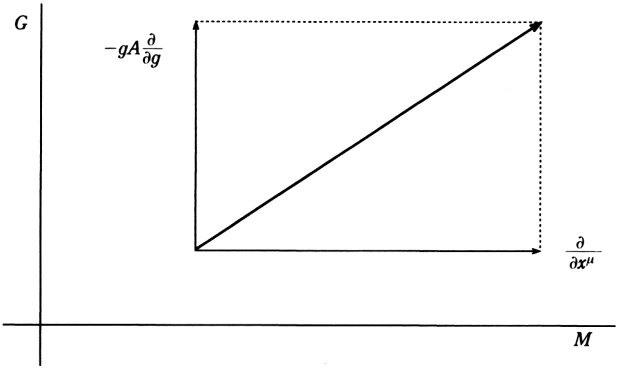


図 3-4 実線の矢印の方向を水平方向と定義する．これは，A_μ によって決定される．つまり，1 つの A_μ が 1 つの水平方向を決める．

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} - A_{\mu,kj}(x)\left(g_{ik}\frac{\partial}{\partial g_{ij}}\right). \tag{3.5}$$

ここで，$A_\mu(x)$ は Lie 代数 G' の要素である (M が Minkowski 空間の場合には，$\mu = 0, 1, 2, 3$)．このように，水平方向は Lie 代数 G' の要素によって特徴づけられ，したがって，水平方向の定義は $A_\mu(x)$ の数だけ無限にあることになる (図 3-4)．この $A_\mu(x)$ を数学の方では接続と呼ぶ．物理学の方では $A_\mu(x)$ はベクトル・ポテンシャルと名付けられている．なお，群 G が行列群 $U(N)$，$SU(N)$ のときには，この $A_\mu(x)$ は反 Hermite 行列であり，第 2 節の $A_\mu(x)$ とは虚数単位 i だけ定義がずれている．

さて，図 3-3 の曲線 $\overline{C}$ 上の点 (x, g) における接線方向は

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} &= \frac{dx^\mu}{dt}\frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{dg_{ij}}{dt}\frac{\partial}{\partial g_{ij}} \\ &= \dot{x}^\mu\frac{\partial}{\partial x^\mu} + \dot{g}_{ij}\frac{\partial}{\partial g_{ij}}\end{aligned} \tag{3.6}$$

である．この曲線 $\overline{C}$ が水平であるためには，式 (3.6) の右辺が (3.5) の 1 次結合になっていなければならない．したがって，

$$\frac{d}{dt} = \dot{x}^\mu\left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} - A_{\mu,kj}(x)\left(g_{ik}\frac{\partial}{\partial g_{ij}}\right)\right) \tag{3.7}$$

であり，これから条件

$$\dot{g}_{ij} = -g_{ik}(t)A_{\mu,kj}(x)\dot{x}^{\mu}(t) \tag{3.8}$$

が結論される．この式 (3.8) を形式的に解くと

$$g(t) = g(0)\mathrm{P}\exp\left(-\int_0^t A_{\mu}(x(\tau))\dot{x}^{\mu}(\tau)\,d\tau\right) \tag{3.9}$$

となり，$g(0)$ から出発して水平な曲線 $\overline{C}(x^{\mu}(t), g(t))$ が決定できた．

式 (3.9) の右辺の記号 P は，指数部分が径路順化されている (path ordered) ことを意味する．つまり，異なる点における $A_{\mu}(x)$ は一般には非可換なので，経路順に対応する A_{μ} を指数の肩に乗せて積をとる，という意味である．ここでは，曲線 C が 1 つに地図に中に収まると仮定したが，収まらないときには当然，必要となる地図の間で座標を調節しなければならない．

ここで水平方向の定義 (3.5) に関して 2 つの注意がある．

1. 式 (3.5) の $A_{\mu}(x)$ は座標 g のとり方に依存する．

   主ファイバー束 P の中の点 $p = (x, g)$ での水平方向を式 (3.5) で定義したが，同一ファイバーの他の点 $p' = (x, g')$ $(g' = g \cdot u, u \in G)$ では垂直方向の係数 $A_{\mu}(x)$ は

$$A'_{\mu}(x) = u^{-1}A_{\mu}(x)u \tag{3.10}$$

   となる．この条件式は，式 (3.5) が変換後も成立するべきであるという要請から導出できる．つまり，元の水平方向の表式

$$\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - A_{\mu,kj}(x)\left(g_{ik}\frac{\partial}{\partial g_{ij}}\right)$$

   に，変換 $g = g' \cdot u^{-1}$ を代入すると，点 (x, g') での水平方向の表式になる．この新たな表式が元のものと変わらない，

$$\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - A_{\mu,kj}(x)\left(g_{ik}\frac{\partial}{\partial g_{ij}}\right) = \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - A'_{\mu,kj}(x)\left(g'_{ik}\frac{\partial}{\partial g'_{ij}}\right) \tag{3.11}$$

   と要請するのである．

2. 式 (3.5) の $A_\mu(x)$ は地図の選び方に依存する．

地図が元の U_β から別の U_α に代わるとき (もちろん，$x \in U_\alpha \cap U_\beta$ である)，転移関数を $t_{\alpha\beta}(x)$ とする．地図 U_β での p の座標 (x, g) は地図 U_α では (x, g')，$g' = t_{\alpha\beta} g$ である．この g と g' の関係は，ある $u \in G$ によって，$g' = g \cdot u$ とも書ける．g および g' は，それぞれ U_β および U_α 上での切断面 $g_\beta(x)$，$g_\alpha(x)$ であるとして，$u = u_{\beta\alpha}(x)$ と書き，この $u_{\beta\alpha}(x)$ を転移関数と称するこもある：

$$g_\alpha(x) = g_\beta(x) u_{\beta\alpha}(x). \tag{3.12}$$

なお，以前に $g(t)$ と書いたものは，ここでは $g(t) = g(x(t))$ のことである．同じものを $g(t)$ と書いたり，$g(x)$ と書いたりすることがあるが，混乱は生じないだろう．

さて，水平性の性質が地図によって変化しては困る．すなわち，切断面 $g(x(t))$ が水平なら，この同じ切断面を別の座標系で見たときの切断面 $g'(x(t))$ も水平でなければならない．したがって，水平性の条件 (3.5) が $g(x)$ と $g'(x)$ の両方で成立すると要請する．そうすると，$g(x)$ の場合の $A_\mu(x)$ が，$g'(x)$ に対して次の $A'_\mu(x)$ に変換されねばならないことがわかる：

$$A'_\mu(x) = u^{-1}(x) A_\mu(x) u(x) - u^{-1}(x) \partial_\mu u(x). \tag{3.13}$$

なお，U_α と U_β で $\overline{C}$ の座標を，$(x, g) \longrightarrow (x', g')$ と変える場合もありうるが，x から x' への変化は簡単に取り扱えるので，上では $x = x'$ とした．

この変換 (3.13) は，物理学の方ではゲージ変換と呼ばれているものである．ここでは，この変換性は理論の整合性のために必要なものとして出現してきている．

3-3 節　平行移動とホロノミー群

3-3-1　平行移動

前節で，主ファイバー束 P における水平方向への移動ということを考えた．点 x が底空間 M 中の曲線 $C : x(t)$ に沿って動くとき，ファイバー空間中の点 $(x(t), g(t))$ の集合は 1 つの曲線 $\overline{C}$ を描く．$g(t)$ が式 (3.9) を満たすときには，曲線 $\overline{C}$ は水平である．この $g(t)$ を，曲線 C に沿った $g(0)$ の平行移動と呼ぶ．ここで，式 (3.9) を次のように書き換えよう：

$$g(x) = g(x_0)\mathrm{P}\exp\left(-\int_C A_\mu(\overline{x})\, d\overline{x}^\mu\right). \tag{3.14}$$

曲線 C は x_0 から x まで動くとする：

$$x_0 = x(0), \quad x = x(t). \tag{3.15}$$

さて，$g(x)$ に対する群 G の作用を考えてみよう．曲線 C 上の点 x で $l \in G$ (l は x に依存しないとする) をファイバー座標に作用させると，

$$g(x) \cdot l = g(x_0)\mathrm{P}\exp\left(-\int_C A_\mu(\overline{x})\, d\overline{x}^\mu\right) \cdot l \tag{3.16}$$

である．

ここで，前節の注意 1 の式 (3.10) によって決定される A'_μ，すなわち

$$A'_\mu(x) = l^{-1} \cdot A_\mu(x) \cdot l \tag{3.17}$$

を導入すると，次の等式が得られる．

$$l \cdot \mathrm{P}\left(-\int_C A'_\mu(\overline{x})\, d\overline{x}^\mu\right) = \mathrm{P}\exp\left(-\int_C A_\mu(\overline{x})\, d\overline{x}^\mu\right) \cdot l. \tag{3.18}$$

式 (3.16) と (3.18) を組み合わせると

$$g(x) \cdot l = (g(x_0) \cdot l)\mathrm{P}\exp\left(-\int_C A'_\mu(\overline{x})\, d\overline{x}^\mu\right) \tag{3.19}$$

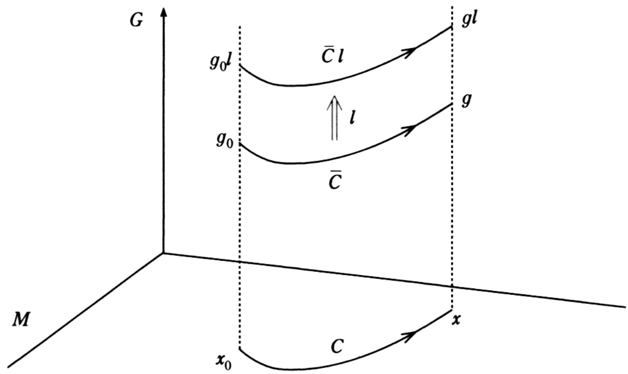


図 3-5 平行移動と群の垂直方向への作用は可換である．つまり，曲線 $\overline{C}$ が水平なら，曲線 $\overline{C}l$ も水平である．

となる．平行移動を決める微分方程式 (3.8) を考慮すると，上式 (3.19) の右辺は，$g(x_0) \cdot l$ を曲線 C に沿って平行移動したものであることがわかる．一方，左辺の方は，$g(x_0)$ を C に沿って平行移動した結果 $g(x)$ に l を作用させたものである．両辺が等しいということは，「平行移動と群の (垂直方向への) 作用は可換である」ということを意味する．つまり，主ファイバー束中の水平な曲線は，群 G の一定の要素の作用によって垂直方向へ移動し，移動後も水平状態を保っている (図 3-5).

なお，式 (3.18) は次のようにも読める：A_μ と A'_μ は本質的には同一のものであり，右辺で右側にある l を左側へ移動させていくと，左辺のように (A_μ を A'_μ に変換しながら進み) l が左端に達する．つまり，始点で l を作用させてから平行移動した結果と，平行移動後に l を作用させた結果が同一となる．

3-3-2 ホロノミー群

底空間 M 上の曲線 C が閉じていても，主ファイバー束中の対応する平行移動曲線 $\overline{C}$ は閉じるとは限らない．つまり，曲線 C の始点に対応する $\overline{C}$ のファイバー座標を g_0，終点に対応する座標を g_1 と書くと，

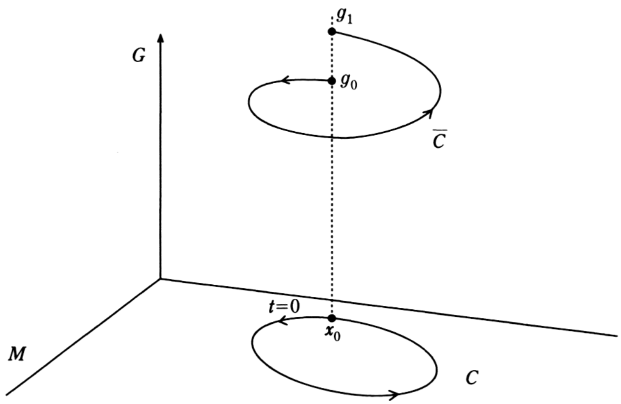


図 3-6　M 上の曲線 C が閉じていても，これを持ち上げた水平な曲線 $\overline{C}$ が閉じるとは限らない．

$$g_1 = g_0 \mathrm{P} \exp\left(-\int_C A_\mu(x)\, dx^\mu\right) \tag{3.20}$$

となり，右辺の指数部分が単位元になるとは限らないからである (図 3-6).

式 (3.20) を

$$g_1 = g_0 H(C) \tag{3.21}$$

と書こう．上式中の $H(C)$ は閉曲線 C に沿う平行移動の作用を表す．一方，この式は群 G のある要素 h_C で

$$g_1 = g_0 \cdot h_C \tag{3.22}$$

とも書ける．ここで，x_0 を始点・終点とするもう一つの閉曲線 C' を考える．g_1 を C' に沿って平行移動した終点を g_2 と書くと，

$$g_2 = g_1 H(C') \tag{3.23}$$

であり，式 (3.21) および (3.22) を用いると

$$
\begin{aligned}
g_2 &= (g_0 H(C))H(C') \\
&= g_0 H(C' \cdot C) \\
&= g_0 \cdot h_{C' \cdot C}
\end{aligned}
\tag{3.24}
$$

となる．記号 $H(C' \cdot C)$ は，C の次に C' に沿って動く［つまり，閉曲線 $C' \cdot C$ についての］平行移動を表す．式 (3.23) は，(3.22) を用いて，次のようにも表現できる：

$$
g_2 = (g_0 \cdot h_C)H(C'). \tag{3.25}
$$

群の作用と平行移動は可換なので，式 (3.25) は

$$
\begin{aligned}
g_2 &= (g_0 H(C')) \cdot h_C \\
&= (g_0 \cdot h_{C'}) \cdot h_C \\
&= g_0 \cdot (h_{C'} \cdot h_C)
\end{aligned}
\tag{3.26}
$$

となる．式 (3.24) と (3.26) により

$$
h_{C' \cdot C} = h_{C'} \cdot h_C \tag{3.27}
$$

が結論できる．

閉曲線 C を逆向きに動く曲線を C^{-1} と書くと，同様の考察によって

$$
h_{C^{-1}} = (h_C)^{-1} \tag{3.28}
$$

が導出できる．

このようにして，x_0 を始点・終点とする閉曲線すべてについての h_C の集合を考えれば，$\{h_C\}$ が群となることがわかる．この群を x_0 を基点とするホロノミー群 (holonomy group) と呼ぶ．

3-4 節　波動関数の平行移動

3-4-1　同伴ファイバー束中の平行移動

さていよいよ，波動関数 ψ の平行移動について調べよう．例えば，ψ がクォーク場で，構造群 G がカラー $SU(3)$ 群とすると，ψ は $SU(3)$ の 3 次元表現に従う．つまり，ψ はこの表現空間 (3 次元複素ベクトル空間) の要素になる．ここでは一般に，ベクトル空間 F 上での群 G の表現 ρ を考える．

波動関数 ψ は G のこの表現に従うとする．つまり，ψ はベクトル束 $(E,\pi,F,\rho(G),M)$ の切断面とする．ここで，F は G の表現空間だから，$\rho(G)$ は F から F への同型写像を与えている．

このベクトル束と深い関係を持つ主ファイバー束は (P,π,G,M) であり，底空間 M の地図帳は，E と P の両者に対して同一としておく (P と E の底空間 M への射影に対して同一の記号 π を用いたが，混乱は生じないだろう)．地図 U_α 上での G と F の座標関数をそれぞれ Φ_α，ϕ_α と書く．さらに，P の転移関数

$$T_{\alpha\beta}(x)=\Phi_{\alpha x}\cdot\Phi_{\beta x}^{-1}\in G \tag{3.29}$$

に対して，E の転移関数

$$t_{\alpha\beta}(x)=\phi_{\alpha x}\cdot\phi_{\beta x}^{-1}\in\rho(G) \tag{3.30}$$

は

$$t_{\alpha\beta}(x)=\rho(T_{\alpha\beta}(x)) \tag{3.31}$$

を満たすとする．

このような場合，E と P は構造群 G の作用に関しては，ほぼ同一の振る舞いを示すことになる．したがって E は P の同伴ファイバー束と呼ばれている (図 3-7)．

ベクトル束 E の中での平行移動は，対応する主ファイバー束 P の中の平行移動を E の言葉で翻訳・表現したものとする．具体的には次のようにする．

底空間 M 上の曲線 $C:x(t)$ を考え，始点 x_0 を，終点を x とする．

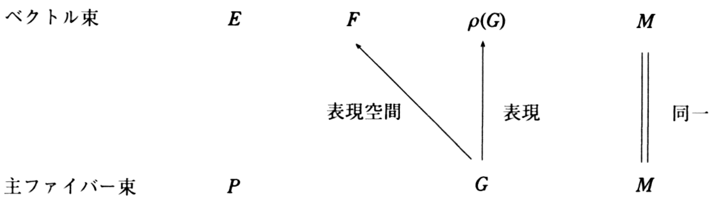


図 3-7　E は P の同伴ファイバー束となる.

$$x_0 = x(0), \quad x = x(t). \tag{3.32}$$

このとき，1 つの地図の中に曲線 C が収まっているものとする (そうでないと，途中で座標変換の必要が生ずる．それでも構わないが，話を簡単にするためにここでは 1 つの地図の中に収まっていると仮定する).

主ファイバー束 P の中で，x_0 上のファイバーの 1 点 g_0 $(\pi(g_0) = x_0)$ をとり，この点 g_0 を曲線 C に沿って平行移動していく．その終点を g $(\pi(g) = x)$ とする．この決定方法は以前に式 (3.9) で示されている．ここでは，同伴ベクトル束 E の中での出発点を ψ_0 $(\pi(\psi_0) = x_0)$ として，終点 ψ $(\pi(\psi) = x)$ を決定したい.

主ファイバー束 P の中で g_0 から g へ移動する効果は，g_0 に左から $(g\cdot g_0^{-1})$ を作用させると求まるので，同伴ファイバー束 E の中では

$$\psi = \rho(g \cdot g_0^{-1})\psi_0 \tag{3.33}$$

としておくとよいはずである (図 3-8).

この定義が，1. 選んだ地図に依存しないこと，そして 2. 出発点の g_0 の選択に依存しないこと，を確かめておく必要がある.

1. 地図を U_β から U_α に変えるとする (地図を変えても，曲線 C は 1 つの地図の中に収まっているとする)．地図 U_α での座標にはダッシュ($'$) を

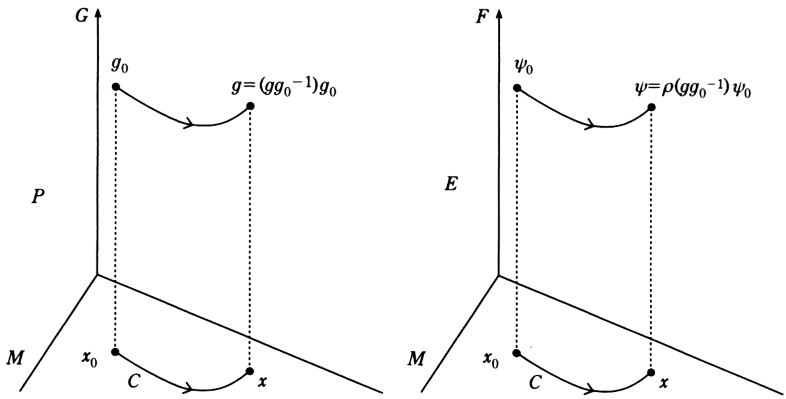


図 3-8　主ファイバー束 P の中での平行移動を同伴ファイバー束 E の中の平行移動へ翻訳する．

つけることにする．転移関数の定義により，

$$g'_0 = t_{\alpha\beta} g_0, \quad g' = t_{\alpha\beta} g \tag{3.34}$$

である．平行移動の式 (3.33) は

$$\psi = \rho(t_{\alpha\beta}{}^{-1} g' g_0'{}^{-1} t_{\alpha\beta})\psi_0 \tag{3.35}$$

となる．ここで，ρ は群 G の表現だから，以下のように順々に変形して行ける．

$$\begin{aligned} \psi \ &= \rho(t_{\alpha\beta})^{-1}\rho(g' g_0'{}^{-1})\rho(t_{\alpha\beta})\psi_0, \\ \rho(t_{\alpha\beta})\ \psi \ &= \rho(g' g_0'{}^{-1})\rho(t_{\alpha\beta})\psi_0, \\ \psi' &= \rho(g' g_0'{}^{-1})\psi'_0. \end{aligned} \tag{3.36}$$

これで，E での平行移動の定義が選んだ地図に依存せず常に式 (3.33) の形であることが確かめられた．

2. 主ファイバー束 P 中での平行移動の出発点を変更して，新たに h_0 ($\pi(h_0) = x_0$) としよう．このとき，$h_0 = g_0 \cdot a$ となる $a \in G$ が存在する．点 h_0 から出発したときの平行移動の終点を h ($\pi(h) = x$) と書くことにす

ると，$h = g \cdot a$ である．これは，平行移動と群の作用が可換だからである．したがって，

$$hh_0^{-1} = gg_0^{-1}$$

となり，

$$\psi = \rho(hh_0^{-1})\psi_0 \tag{3.37}$$

である．つまり，P の中の出発点の選択に無関係に，E 中の平行移動が決まる．

3-4-2　同伴ファイバー束中での共変微分

やはり主ファイバー束 (P, π, G, M) とその同伴ファイバー束 $(E, \pi, F, \rho(G), M)$ を考え，波動関数 $\psi(x)$ を E のある断面とする．底空間 M 中にやはり前項 3-4-1 と同じ曲線 C を考え，$t = 0$ における曲線 C の M 中での接線ベクトルを u と書くことにする．

M の点 x_0 における $\psi(x)$ の (u 方向の) 共変微分 (covariant derivative) を次の式で定義する：

$$\nabla_u \psi\big|_{x_0} = \lim_{t \to 0} \frac{H(0 \leftarrow t)\psi(x(t)) - \psi_0}{t}. \tag{3.38}$$

上式右辺の $H(0 \leftarrow t)\psi(x(t))$ は，波動関数 $\psi(x(t))$ を曲線 C に沿って $x = x(t)$ から $x_0 = x(0)$ へ平行移動した終点の座標を表す (図 3-9)．したがって，共変微分 ∇_u は，$\psi(x)$ が水平方向からずれていくその変化率を与える．

前項 3-4-1 の結果により，

$$H(0 \leftarrow t)\psi(x(t)) = \rho(g(0)g(t)^{-1})\psi(x(t)) \tag{3.39}$$

である．主ファイバー束中の始点 $g(0)$ の選択は任意であるので (3-4-1 項の 2)，$g(0)$ を G の単位元に選ぶことにする．このとき，式 (3.9) により

$$g(t) = \mathrm{P}\exp\left(-\int_0^t A_\mu(x(\tau))\dot{x}^\mu(\tau)\,d\tau\right) \tag{3.40}$$

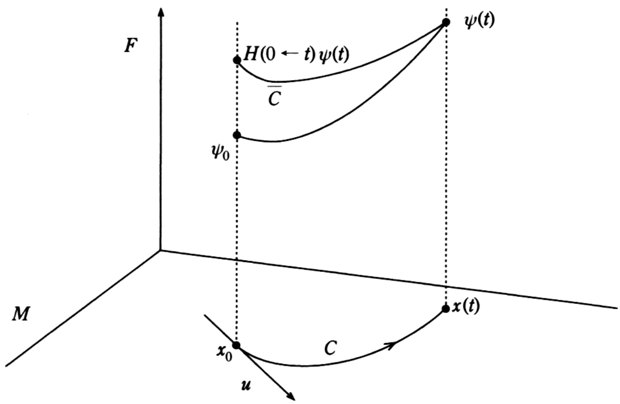


図 3-9　$H(0 \leftarrow t)\psi(t)$ は $\psi(t)$ を C に沿って平行移動した点である.

である．さて，式 (3.38) は

$$\nabla_u \psi \bigg|_{x_0} = \frac{d}{dt}(\rho(g^{-1}(t))\psi(x(t)))\bigg|_{t=0}$$
$$= \left[\dot{x}^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu}\psi(x)\right]_{t=0} - \left[\frac{d}{dt}\rho(g(t))\right]_{t=0}\psi(x_0) \quad (3.41)$$

となる．

一方，群 G の表現 ρ は，同時に対応する代数 G' の表現も与える．このLie 代数の表現を同じ記号 ρ で表すことにする．そうすると，

$$\rho(g(t)) = \mathrm{P}\exp\left(-\int_0^t \rho(A_\mu(x(\tau)))\dot{x}^\mu(\tau)\,d\tau\right) \quad (3.42)$$

となり，

$$\frac{d}{dt}\rho(g(t))\bigg|_{t=0} = -\rho(A_\mu(x_0))\dot{x}^\mu(0) \quad (3.43)$$

が結論できる．

式 (3.41) に (3.43) を代入して，接線ベクトル $u^\mu = \dot{x}^\mu(0)$ を共通因子としてくくり出すと，

$$\nabla_u \psi \Big|_{x_0} = u^\mu \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} + \rho(A_\mu(x)) \right) \psi(x) \Big|_{x_0} \tag{3.44}$$

という結果になる．通常は，$\rho(A_\mu)$ を単に A_μ と書く．これで混乱は生じないからである．したがって，共変微分演算子を

$$D_\mu = \partial_\mu + A_\mu \tag{3.45}$$

と定義すると，

$$\nabla_u = u^\mu D_\mu \tag{3.46}$$

となる．

ここで再び波動関数 ψ の平行移動を具体的に論ずることができる．つまり，$\psi(x)$ が水平になる (ある点からの平行移動になる) 条件は

$$D_\mu \psi(x) = 0 \tag{3.47}$$

であり，これを形式的に解くと

$$\psi(x) = \mathrm{P} \exp \left(-\int_C A_\mu(\overline{x})\, d\overline{x}^\mu \right) \psi(x_0) \tag{3.48}$$

となる．

3-5 節　多重連結領域における Schrödinger 波動関数

以前に (2-2 節)，x-y 平面に垂直に一様な磁場が存在する場合，この平面内の円周上で Schrödinger 方程式を考えた．今度は，同じ平面内の正方形領域 (図 3-10a の OABC) の中を運動する粒子を考えよう．ただし，図の OA と CB，OC と AB をそれぞれ同一視して，この領域をトーラスにして考えることにする．

この問題の一様な磁場の磁束密度を $\varPhi$ として，ベクトル・ポテンシャルを

$$\vec{A} = (0, \varPhi x, 0)$$

と選ぶことにする．このとき，この系を記述するハミルトニアンは

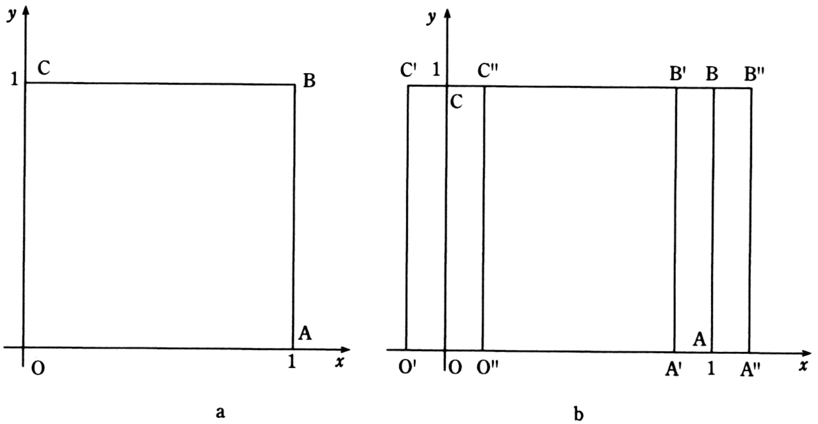


図 3-10　a: トーラス OABC 上を粒子が運動する．紙面に垂直に一様な磁場が存在する．b: $O'O''C''C'$ と $A'A''B''B'$ を貼り合わせてトーラスをつくる．

$$H = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 - \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial y} - ie\Phi x\right)^2$$

となる．さて，$x = 1$ (図の AB) のところと $x = 0$ (図の OC) のところを同一視するわけだが，ここでベクトル・ポテンシャル A_y はそれぞれ 0 と Φ なので，大きさ Φ だけのずれが生じてくる．そこで次のように考えることにしよう．

図 3-10b のように，線分 AB および OC を両側に広げて，幅 2ε の長方形領域をとり，つまり図の $O'O''C''C'$ と $A'A''B''B'$ を考え，これらを貼り合わせることによってトーラスを作ることにする．この際，これらの領域での地図の読み替えは，次のゲージ変換によるものとする［2-6 節の式 (2.56) 参照］:

$$\vec{A}(1+x, y) = \vec{A}(x, y) - \vec{\nabla}\chi$$
$$\psi(1+x, y) = e^{-ie\chi}\psi(x, y), \quad -\varepsilon \leqq x \leqq \varepsilon.$$

ただし，ここで

$$\chi \equiv -\Phi y$$

とする．y 方向については，単に OA と CB を同一視するということだけでよい．このような地図の読み替えとゲージ変換は，この問題の場合には避けることのできないことである．出発点でのベクトル・ポテンシャルの選び方はたくさんあるわけだが，どのように採ってもこの問題がどこかに現れてくるからである．

さてここで，トーラスを x 方向に 1 周してもとの場所へ戻ることを考える．このとき，ゲージ変換のせいで波動関数に位相変化が $e\Phi y$ だけ生ずる．つまり波動関数は (x に関して) 1 価ではない．トーラスを y 方向へ 1 周したときには，ゲージ変換なしにもとへ戻るので位相変化は生じない．つまり，波動関数は y に関しては 1 価である．しかし，波動関数の全体としての非 1 価性は，ベクトル・ポテンシャルをどういう具合に選んでも避けることはできない．

なお，この問題に対しては，$e\Phi = 2\pi$ の場合に閉じた形で解が求まることが知られている [9]．

以上の例によって次のことがわかった：2-1 節の条件 1 が満たされていないときには，つまり考えている領域が単連結でないときには，電磁場が働いている状況下での波動関数［2-1 節の ψ_1］は 1 価関数になるとは限らない．

第 4 章

Berry の位相

4-1 節　断熱定理

Berry の位相を論ずるための準備として，量子力学における断熱定理を見ておこう．

4-1-1　Dirac の表記法の導入

第 1 章では Schrödinger 方程式を

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t)=H(q,p,t)\psi(q,t) \tag{4.1}$$

の形で書いた．ハミルトニアン H が時間に依存しない場合，波動関数に対して変数 q と t を分離した形

$$\psi(q,t)=\exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)\phi(q) \tag{4.2}$$

を仮定すると，時間に依存しない波動関数 $\phi(q)$ は，方程式

$$H(q,p)\phi(q)=E\phi(q) \tag{4.3}$$

を満たす．したがって，E はハミルトニアン H の固有値 (エネルギー固有値) であり，ϕ はこの固有値に属する固有ベクトルである．方程式 (4.3) は時間に依存しない Schr¨odinger 方程式と呼ばれているものである．

以下では，方程式 (4.3) を一般化して，ハミルトニアン H が時間に依存する場合を考える．このとき，E および ϕ は一般に時間に依存することになる．それでもこれが固有値方程式であることに変わりはない．

ここでは議論を簡単にするために，ハミルトニアン H の固有値はすべて離散的であると仮定する．また，以下の式ではだいたいにおいて，時間依存性のみを書き，座標の引数 q は書くことを省略する．方程式 (4.3) に対応して，

$$H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle \tag{4.4}$$

と書く．上式において，Dirac の表記法を用いた．今後，場合に応じてこの記法も利用することにする．式が簡明になるからである．$|n(t)\rangle$ は第 n 番目の固有値 $E_n(t)$ に属する固有ベクトルであり，今までの記法では $\phi_n(q,t)$ と書くべきものである．ここで，n は一般には多成分である：$n = (n_1, n_2, \ldots, n_N)$.

ハミルトニアン $H(t)$ は Hermite 作用素なので異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する：

$$\langle k(t)|n(t)\rangle = \delta_{kn}. \tag{4.5}$$

ここで，$\langle k(t)|$ は $|k(t)\rangle$ の Hermite 共役であり (つまり，$\phi_k^\dagger(q,t)$ に対応し)，左辺は 2 つの固有波動関数 $|k(t)\rangle$ と $|n(t)\rangle$ との内積を意味する［式 (4.5) は今までの記法では，

$$\int \phi_k^\dagger(q,t)\phi_n(q,t)\,dq$$

に対応するものである．このことは，次のパラグラフで示す］．また，(4.5) の右辺は Kronecker のデルタ記号で，その定義式は

$$\delta_{kn} = \begin{cases} 0, & k \neq n \\ 1, & k = n \end{cases}$$

である．

この Dirac の記法では，座標 q の (固有値 q に属する) 固有ベクトル $|q\rangle$ が (仮想的に) あると思い，

$$\phi_n(q,t) = \langle q|n(t)\rangle$$

のように書く．そうすると，内積の式 (4.5) は，$|q\rangle$ の完全性の関係式を用いて，

$$\langle k(t)|n(t)\rangle = \int \langle k(t)|q\rangle\langle q|n(t)\rangle\, dq$$
$$= \int \phi_k^\dagger(q,t)\phi(q,t)\, dq$$

とも書ける．

ここで，後のために 1 つの等式を導いておく．式 (4.4) の両辺を t で微分して，その後，$\langle k(t)|$ との内積をとる ($k \neq n$ とする)．整理してまとめると，

$$\langle k(t)|\dot{n}(t)\rangle = \frac{\langle k(t)\,|\partial H/\partial t|\, n(t)\rangle}{-(E_k(t) - E_n(t))} \tag{4.6}$$

が得られる．ここで，

$$|\dot{n}(t)\rangle = \frac{d}{dt}|n(t)\rangle$$

とおいた．なお，(4.5) で $k = n$ として両辺を微分すると，

$$\langle \dot{n}(t)|n(t)\rangle + \langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle = 0$$

となる．上式の第 1 項と第 2 項は互いに複素共役になっているので，$\langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle$ の実数部分はゼロであることがわかる．したがって，$\langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle$ は純虚数である．この性質も後に使う．

4-1-2　準備

方程式 (4.1) の解 $|\psi(t)\rangle$ と方程式 (4.4) の解 $|n(t)\rangle$ の間の関係を調べよう．そのために，次の形で $|\psi(t)\rangle$ を展開して，展開係数 $c_n(t)$ の性質を考えることにする．

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n(t)\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n'(t')\, dt'\right). \tag{4.7}$$

上式で導入した記号は次のようなものである：

$$E'_n(t) = E_n(t) - \hbar\eta_n(t), \tag{4.8}$$

$$\eta_n(t) = i\langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle. \tag{4.9}$$

エネルギー自身ではなく，(4.8) のように E'_n を定義して，これを (4.7) の指数の肩に乗せる理由は後にわかる．

波動関数 $|\psi(t)\rangle$ を (4.1) へ代入して，$\langle k(t)|$ との内積をとると，次のようになる (引数の時間 t を大部分省略した)：

$$\begin{aligned}\langle k| \Bigg(\sum_n i\hbar \left(\dot{c}_n|n\rangle + c_n|\dot{n}\rangle - \frac{i}{\hbar}E'_n c_n|n\rangle \right) \\ \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E'_n(t')\,dt' \right) \Bigg) \\ = \langle k| \left(\sum_n c_n H|n\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E'_n(t')\,dt' \right) \right).\end{aligned} \tag{4.10}$$

ここで，(4.4)，(4.5)，(4.6) を用いて整理すると，

$$\frac{d}{dt}c_k = \sum_{n\neq k} \frac{\langle k|\partial H/\partial t|n\rangle}{E_k - E_n} \exp\left(+\frac{i}{\hbar}\int_0^t E'_{kn}(t')\,dt' \right) c_n \tag{4.11}$$

となる．ここで，

$$E'_{kn}(t) = E'_k(t) - E'_n(t) \tag{4.12}$$

とおいた．式 (4.11) の右辺の和で $n = k$ のところがなくなるのは，式 (4.7) の指数に，E'_n を通じて (4.9) の η_n を含めたからである．

ここまでは，(固有値は離散的と仮定したが，それ以外の点ではだいたい) 一般的な話である．次に，断熱過程を考える．

4-1-3　断熱定理

時刻 $t = 0$ で系の状態は，m 番目の固有状態にあるものとする：

$$|\psi(t=0)\rangle = |m(0)\rangle.$$

ハミルトニアン $H(t)$ は，$t = 0$ から $t = T$ にかけて時間とともにゆっくり変化する (断熱過程) と仮定する．この状況を扱うために

$$t = \tau T, \quad 0 \leqq \tau \leqq 1$$

という関係式によって，パラメタ τ を導入する．そして，T は非常に大きな数とする．

波動関数 $|\psi(t)\rangle$ は一般には，固有状態 $|m(0)\rangle$ から出発しても，時間発展とともに式 (4.7) のように，初期状態とは異なる固有ベクトル成分 $|n(t)\rangle$ を含む．しかし，今から示す断熱定理の条件のもとでは，エネルギー固有値 $E_m(t)$ に属する固有ベクトル $|m(t)\rangle$ 以外の成分は $|\psi(t)\rangle$ にはほとんど現れない，つまり $|\psi(t)\rangle$ は，ほぼ確実に固有値番号を変えないで時間発展していく，ということが証明できる．

以下では，例えば $E_n(\tau)$ は $E_n(\tau T)$ を意味するが，混乱は生じないだろう．今考えている状況に対応して，$|\psi(t)\rangle$ の展開係数 $c_n(t)$ は

$$c_n(0) = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}$$

を満たす．

次の条件のもとで，

$$c_k(\tau) = \delta_{km} + O\left(\frac{1}{T}\right) \tag{4.13}$$

である，というのが量子力学における断熱定理 (の 1 つの表現方法) である．

条件 1.

$$\left| \frac{\langle k(\tau)\,|\partial H(\tau)/\partial \tau|\, n(\tau)\rangle}{E_k(\tau) - E_n(\tau)} \right| < M_{kn}. \tag{4.14}$$

条件 2.

$$\left| \frac{1}{E'_k(\tau) - E'_n(\tau)} \right| < N. \tag{4.15}$$

上の条件式において，$k \neq n$ であり，また N は定数，M は定数行列である．これらの条件は，エネルギー準位が縮退しなければ成立するものと期待される．なお，断熱定理についての詳しい議論は，例えば，Messiah の本 [1] にある．

4-1-4　証明

係数 $c_k(t)$ に対する方程式 (4.11) を次のように書き換える：

$$\frac{d}{d\tau}c_k(\tau) = \sum_n U_{kn}(\tau)c_n(\tau), \tag{4.16}$$

$$U_{kn}(\tau) = \begin{cases} 0, & (n = k) \\ \dfrac{\langle k(\tau)\,|\partial H/\partial\tau|\,n(\tau)\rangle}{E_k(\tau) - E_n(\tau)} \exp\left(\dfrac{iT}{\hbar}\displaystyle\int_0^{\tau} E'_{kn}(\tau')\,d\tau'\right), & (n \neq k). \end{cases} \tag{4.17}$$

方程式 (4.16) の解は次のようになる：

$$c_k(\tau) = \delta_{km} + \sum_{j=1}^{\infty}\int_0^{\tau} d\tau_j \int_0^{\tau_j} d\tau_{j-1}\cdots\int_0^{\tau_3} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \cdot [U(\tau_j)U(\tau_{j-1})\cdots U(\tau_2)U(\tau_1)]_{km}. \tag{4.18}$$

これが解であることは，(4.18) を τ で微分してまとめ直すと，(4.16) の右辺になる，という直接の計算によって確かめられる．

まず，次の積分を調べよう：

$$I = \int_0^{\tau} d\tau'\, U_{lm}(\tau'). \tag{4.19}$$

条件 1. により

$$|I| < M_{lm}\left|\int_0^{\tau} d\tau' \exp\left(\frac{iT}{\hbar}\int_0^{\tau'} E'_{lm}(\tau'')\,d\tau''\right)\right| \tag{4.20}$$

となる．ここで

$$\delta(\tau) = \int_0^{\tau} E'_{lm}(\tau')\,d\tau' \tag{4.21}$$

とおいて，(4.20) の右辺の積分変数を τ' から $\delta(\tau')$ に変換すると，

$$|I| < M_{lm} \left| \int_0^{\delta(\tau)} d\delta(\tau') \frac{\exp\left(iT\delta(\tau')/\hbar\right)}{d\delta(\tau')/d\tau'} \right|$$

となる．上式右辺の分母は (4.21) により，

$$\frac{1}{d\delta(\tau')/d\tau'} = \frac{1}{E'_{lm}(\tau')} = \frac{1}{E'_l(\tau') - E'_m(\tau')}$$

だから，条件 2. が適用できて，

$$|I| < NM_{lm} \left| \int_0^{\delta(\tau)} d\delta \cdot \exp\left(\frac{iT}{\hbar}\delta\right) \right|$$

となる．次に

$$\int_0^{\delta(\tau)} d\delta \cdot \exp\left(\frac{iT\delta}{\hbar}\right) = \frac{\exp\left(iT\delta(\tau)/\hbar\right) - 1}{iT/\hbar}$$

だから，

$$|I| < \frac{2\hbar NM_{lm}}{T} \tag{4.22}$$

が結論できる．

さて，式 (4.18) の積分を

$$\int d\tau_j \int d\tau_{j-1} \cdots d\tau_2 [U(\tau_j)U(\tau_{j-1}) \cdots U(\tau_2)]_{kl} \int d\tau_1 U(\tau_1)_{lm}$$

と書き直して，上の結果 (4.22) を用いると，

$$|c_k(\tau) - \delta_{km}| < \sum_{j=1}^{\infty} \left| \int d\tau_j \cdots \int d\tau_2 [U(\tau_j) \cdots U(\tau_2)]_{kl} \right| \frac{2\hbar NM_{lm}}{T}$$

となる．上式右辺の U の行列要素すべてに対して，条件 1. を適用すると，

$$|c_k(\tau) - \delta_{km}| < \frac{2\hbar NM_{lm}}{T} \cdot \sum_{j=1}^{\infty} (M^{j-1})_{kl} \cdot \int_0^{\tau} d\tau_j \cdots \int_0^{\tau_3} d\tau_2$$

が得られる．この右辺の積分値は

$$\frac{\tau^{j-1}}{(j-1)!}$$

となるので，結局

$$|c_k(\tau) - \delta_{km}| < \frac{2\hbar N M_{lm}}{T} \cdot \sum_{j=1}^{\infty} \frac{((M\tau)^{j-1})_{kl}}{(j-1)!}$$

である．これから

$$\begin{aligned} |c_k(\tau) - \delta_{km}| &< \frac{2\hbar N}{T} \cdot (e^{M\tau})_{kl} M_{lm} \\ &< \frac{2\hbar N}{T} \cdot (e^{M\tau} M)_{km} \end{aligned} \tag{4.23}$$

が結論できる．(4.23) は (4.13) を意味する．

以上の証明は，文献 [10](pp. 254 ～ 258) の断熱定理の条件をさらに強くして，その分証明を簡単化したものである．

4-1-5　断熱定理が有効な 1 つの具体例

先に進む前にここで，断熱定理の様子をさらによく理解するために役立つと思える 1 つの例を示すことにする．次のハミルトニアンを調べる：

$$\begin{aligned} H(t) &= -\vec{\sigma} \cdot \vec{B}(t), \\ \vec{B}(t) &= (B_0 \cos \omega t, -B_0 \sin \omega t, B_3). \end{aligned}$$

ここで，

$$\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$$

は Pauli スピン行列で，

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

と定義されるものである．角度 θ を

$$\tan \theta = \frac{B_0}{B_3}$$

と定義する．磁場 $\vec{B}$ は z 軸と角度 θ を保ちながら角速度 ω で負の方向に回転している．この磁場の回転の周期は $T = \omega/(2\pi)$ である．

このハミルトニアンは，(座標原点にある) スピンがこの磁場の影響下にある状況を記述するものと見なせる．容易にわかるように，このハミルトニアンの固有値は $\pm B$，$B \equiv \sqrt{B_0^2 + B_3^2}$ である．$-B$ および $+B$ に属する固有ベクトルをそれぞれ $u_1(t)$，$u_2(t)$ と書くことにすると，次のようになる：

$$u_1(t) = \begin{pmatrix} e^{i\omega t}\cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad u_2(t) = \begin{pmatrix} e^{i\omega t}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ -\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

これらが実際に固有ベクトルであることを確かめるときに，次の関係式が役立つだろう：

$$\tan\frac{\theta}{2} = \frac{B_0}{B_3 + B}.$$

これらの固有ベクトルの位相は

$$u_n(t = 2\pi/\omega) = u_n(t = 0), \quad n = 1, 2$$

という条件を満たすように選んである．

さて出発の時刻 $t = 0$ において，この系は固有状態 $u_1(t = 0)$ にあるものとし，その後の時刻 t での状態を

$$\begin{aligned} &\psi(t) = c_1(t)u_1(t) + c_2(t)u_2(t), \\ &c_1(0) = 1, \quad c_2(0) = 0, \end{aligned}$$

としよう．この波動関数は Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H(t)\psi(t)$$

に従って時間発展していく．この方程式から $\psi(t)$ の展開係数 $c_1(t)$ と $c_2(t)$ に対する連立方程式が得られる：

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = -\frac{i}{\hbar}K\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix},$$

$$K \equiv \begin{pmatrix} -B + \hbar\omega\cos^2\frac{\omega}{2} & \hbar\omega\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} \\ \hbar\omega\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} & B + \hbar\omega\sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

行列 K の固有値は

$$E_\pm = \frac{1}{2}(\hbar\omega \pm \sqrt{\hbar^2\omega^2 + 4B^2 - 4\hbar\omega B\cos\theta})$$

である．したがって，対称行列 K を対角化する直交行列を T として，

$$\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = T\begin{pmatrix} e_+(t) \\ e_-(t) \end{pmatrix}$$

とおくと，

$$e_\pm(t) = e_\pm(0)e^{-iE_\pm t/\hbar}$$

となる．

ここで断熱近似を導入することにする．つまり，ここから先は $\hbar\omega/B$ が 1 と比べて圧倒的に小さいと仮定しよう．そうすると

$$T \approx \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{4B}\sin\theta & 1 \\ 1 & -\frac{\hbar\omega}{4B}\sin\theta \end{pmatrix}$$

であり，初期条件は

$$e_+(0) \approx \frac{\hbar\omega}{4B}\sin\theta, \quad e_-(0) \approx 1$$

となる．このようにして結局，次の結果が得られる：

$$c_1(t) \approx \left(\frac{\hbar\omega}{4B}\sin\theta\right)^2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_+t\right) + 1\cdot\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_-t\right),$$

$$c_2(t) \approx \left(\frac{\hbar\omega}{4B}\sin\theta\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_+t\right) + \left(-\frac{\hbar\omega}{4B}\sin\theta\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_-t\right).$$

この結果により，波動関数 $\psi(t)$ に対して

$$\psi(t) \approx u_1(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_-t\right)$$

という近似的表現が得られる．ここで，断熱近似のもとでは

$$E_- \approx -B + \frac{1}{2}\hbar\omega(1+\cos\theta)$$

となることに注意しよう．この式の右辺の第 2 項が波動関数 $\psi(t)$ に与える位相因子は

$$-\frac{1}{2}\omega(1+\cos\theta)t$$

である．これはちょうど，4-1-2 項の (4.9) の η_1 の部分が与える位相と一致している：

$$\begin{aligned}\int_0^t \eta_1(t')\,dt' &= \int_0^t iu_1(t')^*\dot{u}_1(t')\,dt' \\ &= \int_0^t \left(-\omega\cos^2\frac{\theta}{2}\right)dt' \\ &= -\frac{1}{2}\omega(1+\cos\theta)t.\end{aligned}$$

4-2 節　Berry の位相

ハミルトニアン H が時刻 t とともにゆっくりと変化し，ある時間 T の後に再び出発時と同一のものに戻る場合を考える．ゆっくり変化するという

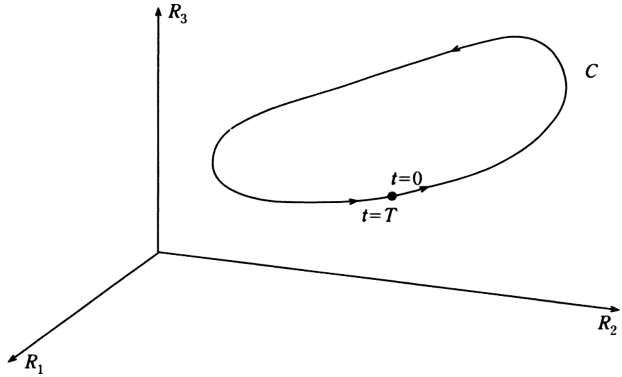


図 4-1　パラメタ $\vec{R}(t)$ は時間 T の間にループ C を描いて元の出発点へ戻る．

のは，前節の断熱定理が適用できる程にゆっくり，ということである．また，ハミルトニアンの時間依存性は，あるパラメタの集合 $\vec{R}(t)$ を通じて現れるとする．$\vec{R}(t)$ は一般には n 次元ベクトルで，ここでは $n \geqq 2$ とする．例えば，$\vec{R}(t)$ は時間的に変化する外部磁場 $\vec{B}(t)$ であり，あるいは，3 次元調和振動子のバネ定数 $(k_1(t), k_2(t), k_3(t))$ とかである．パラメタ $\vec{R}(t)$ の次元を 2 以上としたので，図 4-1 のように時間 T の間に $\vec{R}(t)$ がパラメタ空間 n 次元中でループ C を描いて元へ戻る状況を考えることができる．

以下しばらく，考察の対象とする波動関数，ハミルトニアン H 等においては時間依存性のみを明示して，他は書くことを省略する．さらに，ハミルトニアン $H(\vec{R}(t))$ は前節の断熱定理が成立するための諸条件をすべて満たしていると仮定する．特に，ハミルトニアン $H(\vec{R}(t))$ の固有値は離散的であるとし，出発時刻 $t = 0$ において我々の波動関数は，その固有状態の 1 つである，つまり

$$|\psi(t = 0)\rangle = |m(\vec{R}(0))\rangle$$

であるとする．

断熱定理の条件等を緩めることは可能であり，さらに今からの議論も一般化は多方面に展開できるが，話を簡単にして要点を明らかにするために，種々の仮定をおいているのである．

出発後の時刻 t での波動関数は一般的には，前節の (4.7) のような形であるが，これに断熱定理の結論

$$c_n(t) = \delta_{nm} + O\left(\frac{1}{T}\right)$$

を考慮すると［以下では，上式右辺の第 2 項を無視する］，

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= |m(\vec{R}(t))\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E'_m(t')\,dt'\right) \\ &= |m(\vec{R}(t))\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_m(t')\,dt'\right)\exp\left(i\gamma_m(t)\right)\end{aligned} \tag{4.24}$$

である．時間 T の後にパラメタ $\vec{R}$ が出発時の値に戻る状況を調べたいので，固有状態 $|m(\vec{R})\rangle$ は $\vec{R}$ について 1 価になっていると仮定する．上式 2 行目の第 1 の指数はエネルギー固有値による通常の時間発展の位相である．ここでは，第 2 の指数因子

$$\begin{aligned}\gamma_m(t) &= \int_0^t \eta_m(t')\,dt' \quad \text{← (4.9)} \\ &= i\int_0^t \langle m(\vec{R}(t'))|\dot{m}(\vec{R}(t'))\rangle\,dt'\end{aligned} \tag{4.25}$$

を考えてみよう．

パラメタ $\vec{R}(t)$ は 3 次元ベクトルと考えて以下の変形を行っていくが，一般の次元へはすぐに拡張できる．まず，

$$\gamma_m(T) = i\int_0^T \langle m(\vec{R}(t))|\dot{m}(\vec{R}(t))\rangle\,dt \tag{4.26}$$

において，$\gamma_m(T)$ は実数であることに注意しよう (このことは，4-1-1 項の末尾のところで示した)．積分変数 t を $\vec{R}$ へ変換すると，

$$\begin{aligned}\gamma_m(T) &= i\int_0^T \langle m(\vec{R}(t))|\vec{\nabla}_R m(\vec{R}(t))\rangle\dot{\vec{R}}(t)\,dt \\ &= i\oint_C \langle m(\vec{R}(t))|\vec{\nabla}_R m(\vec{R}(t))\rangle d\vec{R}(t) \\ &= \gamma_m(C)\end{aligned} \tag{4.27}$$

となる．ここで，$\vec{R}$ の積分路は図 4-1 のようなループ C である．また，上式ではベクトル記号の間の内積記号 $(\cdot)$ を省略した．さらに，(4.27) の値は時間 T というよりもループ C に依存するので，第 3 行目でこの量を $\gamma_m(C)$ と書くことにした．

ここで，Stokes の定理を使うと，

$$\begin{aligned}\gamma_m(C) &= -\mathrm{Im}\oint_C \langle m(\vec{R})|\vec{\nabla} m(\vec{R})\rangle \cdot d\vec{R} \\ &= -\mathrm{Im}\iint_S [\vec{\nabla}\times\langle m(\vec{R})|\vec{\nabla} m(\vec{R})\rangle]\cdot d\vec{S} \end{aligned} \tag{4.28}$$

となる．上式では，$\langle m(\vec{R})|\vec{\nabla} m(\vec{R})\rangle$ が純虚数であることに注意し，ベクトルの外積を記号 $\times$ で表した．面積分はループ C を境界とするパラメタ空間内の曲面 S について行う．また，$\vec{\nabla}$ の下添字 R は省略した．勾配の回転はゼロ $(\vec{\nabla}\times\vec{\nabla}|m(\vec{R})\rangle = 0)$ という事実を用いると，

$$\gamma_m(C) = -\mathrm{Im}\iint_S [\langle\vec{\nabla} m(\vec{R})|\times|\vec{\nabla} m(\vec{R})\rangle]\cdot d\vec{S} \tag{4.29}$$

が得られる．

式 (4.29) の 2 つの状態ベクトルの間に完全性関係式

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \tag{4.30}$$

を挿入する．そして，$\langle m|\vec{\nabla} m\rangle$ が純虚数となるので，(4.30) の n が m の部分は (4.29) に寄与しないことに注意すると

$$\gamma_m(C) = -\mathrm{Im}\iint_S \sum_{n\neq m}[\langle\vec{\nabla} m(\vec{R})|n(\vec{R})\rangle\times\langle n(\vec{R})|\vec{\nabla} m(\vec{R})\rangle]\cdot d\vec{S} \tag{4.31}$$

が得られる．

さて，(4.6) を導出するのと全く同じ方法で次式が成立することがわかる：

$$\langle n(\vec{R})|\vec{\nabla} m(\vec{R})\rangle = \frac{\langle n(\vec{R})|\vec{\nabla} H|m(\vec{R})\rangle}{-(E_n - E_m)}. \tag{4.32}$$

ここで，E_n 等の $\vec{R}$ に対する依存性を表示するのを省略した．(4.32) を (4.31) へ代入すると，次の式が結論できる：

$$\gamma_m(C) = -\iint_S \vec{V}_m(\vec{R}) \cdot d\vec{S}, \tag{4.33}$$

$$\vec{V}_m(\vec{R}) = \mathrm{Im} \sum_{n \neq m} \frac{\langle m(\vec{R})|\vec{\nabla} H|n(\vec{R})\rangle \times \langle n(\vec{R})|\vec{\nabla} H|m(\vec{R})\rangle}{(E_n - E_m)^2}. \tag{4.34}$$

以上の種々の表現［線積分 (4.27)，面積分 (4.28)，(4.33)］を持つ $\gamma_m(C)$ が Berry の位相と呼ばれているものであり，一般にはゼロとは限らない量である．この位相に対する上記のような最終的な定式化は，1983 年に Berry によって与えられたものである [11].

注意 1

式 (4.24) からは一見，$\gamma_m(C)$ の値が固有ベクトル $|m(\vec{R})\rangle$ の位相の不定性に影響されるように見える．しかし実際には，表式 (4.34) は固有ベクトル $|m(\vec{R})\rangle$ の位相が $\gamma_m(C)$ の値に寄与しないことを示している．$\langle m(\vec{R})|$ と $|m(\vec{R})\rangle$ で位相が打ち消し合うからである．あるいは，(4.28) の 2 行目から，$|m(\vec{R})\rangle$ の位相を変化させることによって新たに生ずる項は勾配の回転となってゼロになる，ということからもわかる．

注意 2

式 (4.34) で定義したベクトル $\vec{V}_m(\vec{R})$ は

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V}_m(\vec{R}) = 0 \tag{4.35}$$

を満たす．これは，(4.34) から直接計算して示すことができる (やや計算は長くなるが)．しかし，もっと簡単に (4.28) の 2 行目から，回転の発散はゼロという一般的性質により (4.35) が直ちにわかる．$\vec{V}_m(\vec{R})$ の発散がゼロということから，閉曲線 C を境界とする曲面 S のとり方の任意性が $\gamma_m(C)$ の値に影響を与えないことがわかる．

注意 3

式 (4.27) において，

$$\vec{A}(\vec{R}) = i\langle m(\vec{R})|\vec{\nabla}|m(\vec{R})\rangle \tag{4.36}$$

と書いてこれをベクトル・ポテンシャルと思うと，$\gamma_m(C)$ は，$\vec{A}$ の曲線 C に沿う線積分で，これが磁場 $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ の面積分としても表し得る，ということになっている．なお，状態 $|m(\vec{R})\rangle$ の位相を

$$|m(\vec{R})\rangle \longrightarrow |m(\vec{R})\rangle' = |m(\vec{R})\rangle \exp\left(i\theta(\vec{R})\right) \tag{4.37}$$

と変換することは，$\vec{A}(\vec{R})$ のゲージ変換に対応する：

$$\vec{A}(\vec{R}) \longrightarrow \vec{A}(\vec{R})' = \vec{A}(\vec{R}) - \vec{\nabla}\theta(\vec{R}). \tag{4.38}$$

4-3 節　Berry の位相の数学的側面

4-3-1　ホロノミー

固有ベクトル $|m(\vec{R}(t))\rangle$ の時間 t に対する依存性は，パラメタ $\vec{R}(t)$ を通じて生ずるのみである (ハミルトニアン H の時間依存性が $\vec{R}(t)$ に起因するとしたからである)．前節 4-2 では $t=0$ から $t=T$ にかけて $\vec{R}$ がパラメタ空間中のループ C に沿って一周するプロセスを考察した．

$$\vec{R}(T) = \vec{R}(0). \tag{4.39}$$

また，$|m(\vec{R}(t))\rangle$ は $\vec{R}$ に関して一価と仮定したので

$$|m(\vec{R}(T))\rangle = |m(\vec{R}(0))\rangle \tag{4.40}$$

となっている．

* * * * * * *

$\vec{R}$ の空間すべてについては，$|m(\vec{R})\rangle$ に対して連続的に一価性を要求できないことが生じ得る．しかしここでは，局所的に一価ならそれで十分である．このような場合，$\vec{R}$ の空間はいくつかの地図を持つことになる．この $\vec{R}$ 空間の中で地図を替えるときには，$|m(\vec{R})\rangle$ の位相を，乗り換える地図の間で翻訳して変化させることになる．しかし，前節 B の注意 1 で示したように，Berry の位相 $\gamma_m(C)$ は $|m(\vec{R})\rangle$ の位相に依存しないから，困った事態は発生しないのである．

ただし，パラメタ $\vec{R}$ の空間が多重連結の場合には，固有ベクトル $|m(\vec{R})\rangle$ がどうしても多価になってしまうことがある．この場合にはもちろん，$|m(\vec{R}(T))\rangle$ と $|m(\vec{R}(0))\rangle$ との位相が異なり，この差からまた別の位相が発生する．しかし以下では，このような場合は除外して考えることにする．

* * * * * * *

我々の波動関数 $|\psi(t)\rangle$ から自明な時間依存の位相部分［式 (4.24) の右辺の 1 番目の指数因子］を取り去った残りを

$$|\phi(\vec{R}(t))\rangle = |m(\vec{R}(t))\rangle \exp\left(i\gamma_m(t)\right) \tag{4.41}$$

と定義しよう．エネルギー $E_m(\vec{R}(t))$ が常にゼロとなっている場合には，この $|\phi(\vec{R})\rangle$ は $|\psi(t)\rangle$ と同一のもので，Schrödinger 方程式の (近似的) 解である．

そうすると，

$$\begin{aligned} |\phi(\vec{R}(T))\rangle &= |m(\vec{R}(T))\rangle \exp\left(i\gamma_m(C)\right) \\ &= |m(\vec{R}(0))\rangle \exp\left(i\gamma_m(C)\right) \end{aligned} \tag{4.42}$$

であるから，$|\phi(\vec{R}(t))\rangle$ の方は一般には一価ではなく，Berry の (非可積分) 位相 $\gamma_m(C)$ を伴うことになる．この非一価性の可能性がある $|\phi(\vec{R}(t))\rangle$ を特徴づける式は，

$$\langle\phi(\vec{R}(t))|\dot{\phi}(\vec{R}(t))\rangle = 0 \tag{4.43}$$

である．このことは，$|\phi(\vec{R}(t))\rangle$ の定義式 (4.41) と $\gamma_m(t)$ の定義式 (4.25) を用いて左辺を計算すると，すぐに確かめられる．

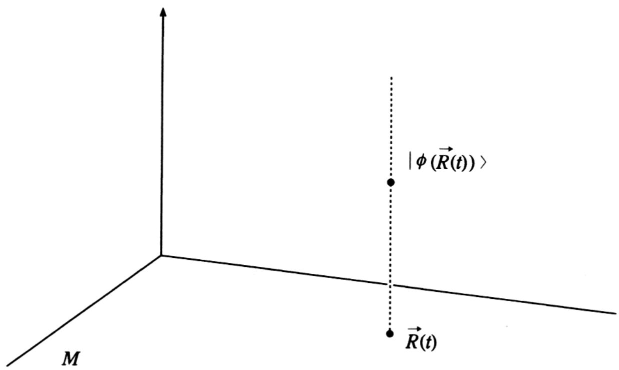


図 4-2　$|\phi(\vec{R}(t))\rangle$ はファイバー束 (E, π, F, G, M) の切断面である.

さて，次のようなファイバー束 (E, π, F, G, M) を考えよう．底空間 M はパラメタ $\vec{R}(t)$ の空間である．ファイバー F は，自明な時間発展因子を取り除いた波動関数 $|\phi(\vec{R}(t))\rangle$ の空間である．構造群 G は $U(1)$ で，$|\phi(\vec{R}(t))\rangle$ の位相を変化させる作用をする．つまり，$\exp(i\theta)$ (θ は実数) を $|\phi(\vec{R}(t))\rangle$ に乗算する作用を行う (図 4-2).

このファイバー束 E の中での平行移動は，条件 (4.43) を満たすようなものであると定義する．つまり，$|\phi(\vec{R}(t))\rangle$ からの変化 $|\dot{\phi}(\vec{R}(t))\rangle$ は元の $|\phi(\vec{R}(t))\rangle$ と直交する方向に向かうものとする．この条件から (4.41) を経由して前節の議論につながっていく訳である．そして，接続は (4.36) のベクトル・ポテンシャル $\vec{A}(\vec{R})$ となる．前節の計算結果は，$|\phi(\vec{R}(t))\rangle$ で表すと (4.42) であり，図 4-3 に示すような状況を与える．

結局，Berry の位相はこのファイバー束のホロノミー群に対応している．すなわち，$\exp(i\gamma_m(C)) \in G$ がホロノミー群の要素ということである [12].

4-3-2　平行移動条件 $\langle\psi|\dot{\psi}\rangle = 0$ の簡単な例

単位球面上の接ベクトルの平行移動が，$\langle\psi|\dot{\psi}\rangle = 0$ という形で定式化できることを見ておこう [13].

長さ 1 の接ベクトル $\vec{a}$ の単位球面上での平行移動を次のように定義する：この球面が存在する 3 次元ユークリッド空間中で通常の平行移動を行い，その後に，球面に対する垂直成分を切り捨てて，長さを 1 に調整する．この平

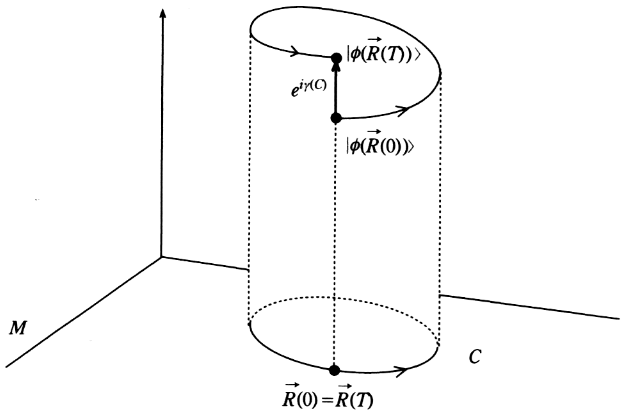


図 4-3　$|\phi(\vec{R}(0))\rangle$ を C に沿って平行移動すると $|\phi(\vec{R}(T))\rangle$ となる.

行移動は次のような条件式で表現できる：

$$\dot{\vec{a}} = \vec{s} \times \vec{a}. \tag{4.44}$$

ここで，接ベクトル $\vec{a}$ が接している球面上の位置を $\vec{r}$ で表し，その点の移動速度を $\dot{\vec{r}}$ とし，

$$\vec{s} = \vec{r} \times \dot{\vec{r}} \tag{4.45}$$

と定義した．なお，

$$\vec{a} \cdot \vec{r} = 0, \tag{4.46}$$

$$\vec{s} \cdot \vec{r} = 0 \tag{4.47}$$

が成立していることは明らかである (図 4-4)．また，(4.44) が $\vec{a}$ の長さを保存することもすぐわかる.

なぜ (4.44) が成り立つかを示すには，$\vec{a}$ が (1) $\dot{\vec{r}}$ の方向を向いている場合と，(2) $\vec{s}$ の方向を向いている場合，について考えておけば十分である．$\vec{a}$ は (1) と (2) の場合の線形結合で表現できて，(4.44) は $\vec{a}$ に関して線形の式だからである.

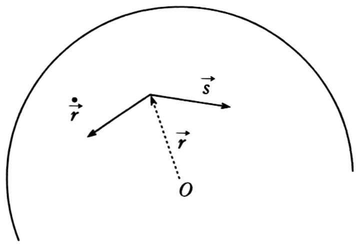


図 4-4　$\vec{s} = \vec{r} \times \dot{\vec{r}}$ と定義する.

(1)［図 4-5］$\vec{a}//\dot{\vec{r}}$ の場合.

球面上の点の位置はどこでも対等なので，今考えている点を北極としておこう．一定の角速度 ω で点が図の方向へ移動するとする：

$$|\dot{\vec{r}}| = |\vec{r}|\omega = \omega. \tag{4.48}$$

このとき，ベクトル $\vec{s}$ の大きさは

$$|\vec{s}| = |\vec{r}| \cdot |\dot{\vec{r}}| = \omega \tag{4.49}$$

で，その方向は図から手前に向いている．長さ 1 のベクトル $\vec{a}$ は，

$$\vec{a} = \dot{\vec{r}}/\omega \tag{4.50}$$

と書ける．このとき，$\vec{r}$ は単振動の式を満たすので，

$$\begin{aligned} \dot{\vec{a}} - \vec{s} \times \vec{a} &= \ddot{\vec{r}}/\omega - (-\omega\vec{r}) \\ &= (\ddot{\vec{r}} + \omega^2\vec{r})/\omega \\ &= 0 \end{aligned} \tag{4.51}$$

となる.

(2)［図 4-6］$\vec{a}//\vec{s}$ の場合.

このとき条件 (4.44) は

$$\dot{\vec{a}} = 0 \tag{4.52}$$

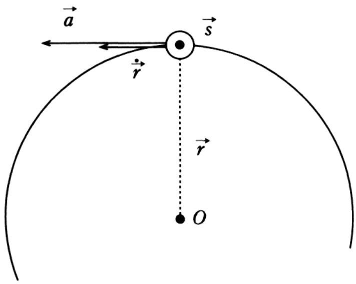


図 4-5　$\vec{a}//\dot{\vec{r}}$ の場合.

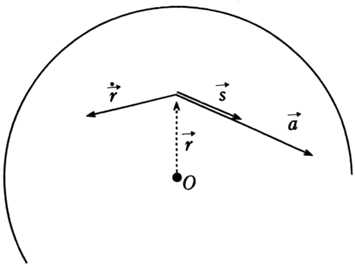


図 4-6　$\vec{a}//\vec{s}$ の場合.

を意味する．これも正しいことは図から明らかである．

さていよいよ，条件式 (4.44) を $\langle\psi|\dot{\psi}\rangle = 0$ の形に書き直そう．この目的のためにもう 1 つ

$$\vec{b} = \vec{r} \times \vec{a} \tag{4.53}$$

というベクトルを導入する (図 4-7)．そうして，

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{a} + i\vec{b}) \tag{4.54}$$

と定義する．今の場合 $|\psi\rangle$ 等は単に 3 次元複素ベクトルで，$\langle\psi'|\psi\rangle$ はそれらの内積を意味する．

まず，

$$\dot{\vec{b}} = \vec{s} \times \vec{b} \tag{4.55}$$

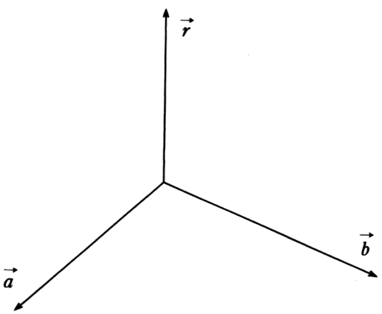


図 4-7　$\vec{b} = \vec{r} \times \vec{a}$.

となることに注意しよう．この等式は，ベクトル $\vec{b}$ の平行移動ということからも明らかだが，直接計算しても確かめられる．したがって，

$$|\dot{\psi}\rangle = \vec{s} \times |\psi\rangle \tag{4.56}$$

である．ベクトル $|\psi\rangle$ は大きさ 1 に規格化されているので，$\langle\psi|\dot{\psi}\rangle$ の実数部分は明らかにゼロである．次に，虚数部分を計算してみると次のようになる：

$$\begin{aligned}
\mathrm{Im}\langle\psi|\dot{\psi}\rangle &= \frac{1}{2}(\vec{a}\cdot\dot{\vec{b}} - \vec{b}\cdot\dot{\vec{a}}) \\
&= \frac{1}{2}(\vec{a}\cdot(\vec{s}\times\vec{b}) - \vec{b}\cdot(\vec{s}\times\vec{a})) \\
&= \vec{s}\cdot(\vec{b}\times\vec{a}) \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{4.57}$$

3 行目に移るときに，ベクトル 3 重積の公式を用いた．つまり，2 行目と 3 行目は恒等式である．さらに，$\vec{b}\times\vec{a}$ と $\vec{s}$ が垂直ということから 4 行目が結論できる．したがって，平行移動条件 (4.44) から

$$\langle\psi|\dot{\psi}\rangle = 0 \tag{4.58}$$

が結論できる，ということがわかった．

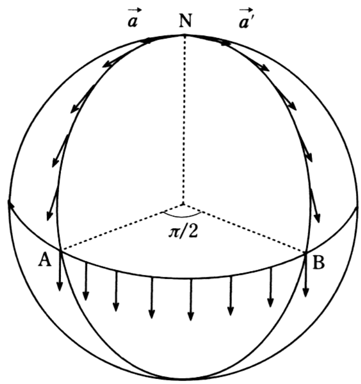


図 4-8 ベクトル $\vec{a}$ を N ⟶ A ⟶ B ⟶ N と平行移動させる (N は北極．AB は赤道上の径路でその長さは全赤道の 1/4 とする．また NA，NB は共に大円に沿う径路とする)．終点で $\vec{a}$ は $\vec{a}'$ に変化しているとする．このとき，$\vec{a}$ と $\vec{a}'$ のなす角度は $\pi/2$ である．この角度は NABN の面積と等しい．

ベクトル $\vec{a}$ ($|\psi\rangle$ と思っても同じことだが) が単位球面上のあるループに沿って平行移動して元へ戻ってくると，出発時とは異なるベクトルになっている，ということを我々は知っている．例えば，図 4-8 のようになる．

ここで問題となるファイバー束 (E, π, F, G, M) においては，ファイバー F は $|\psi\rangle$ の空間，G はユニタリー群 $U(1)$ で $|\psi\rangle$ の位相を変化させる群 ($\exp(i\theta)$ をかけ算する群)，M は単位球面である．

前節では，$|\psi\rangle$ を一価の固有ベクトル $|n(\vec{R})\rangle$ で展開したが，ここでも同様に，球面上の点

$$\vec{r} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$$

における局所的に一価の基底を次のように選ぼう (この基底は $\theta = 0, \pi$ 以外のところで定義されている)[図 4-9]：

$$|n_1(\theta,\phi)\rangle = (-\sin\phi, \cos\phi, 0),$$
$$|n_2(\theta,\phi)\rangle = (-\cos\theta\cos\phi, -\cos\theta\sin\phi, \sin\theta). \qquad (4.59)$$

ベクトル $|\psi\rangle$ の方向を，この基底を基準にして測ることにする．図 4-10 のように，$\vec{n}_1$ から $\vec{a}$ の方向への角度が γ であるとすると，

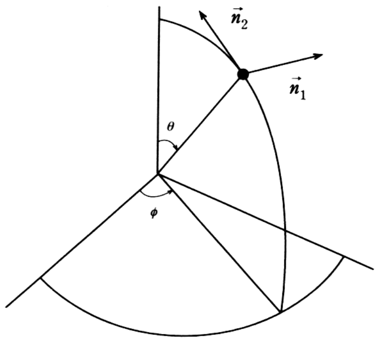


図 4-9 球面上での接ベクトルに対する基底 $\vec{n}_1$ と $\vec{n}_2$.

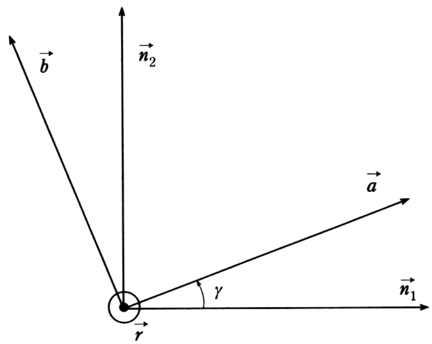


図 4-10 ベクトル $\vec{a}$ の方向を $\vec{n}_1$ を基準として測る.

$$\begin{aligned} \vec{a} &= \cos\gamma|n_1\rangle + \sin\gamma|n_2\rangle, \\ \vec{b} &= -\sin\gamma|n_1\rangle + \cos\gamma|n_2\rangle \end{aligned} \tag{4.60}$$

である.

$|\psi\rangle$ と同様に基底の方も複素化する：

$$|n(\theta,\phi)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n_1(\theta,\phi)\rangle + i|n_2(\theta,\phi)\rangle). \tag{4.61}$$

こうすると，式 (4.60) は次のように簡単になる：

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{a} + i\vec{b}) \\
&= |n\rangle \exp(-i\gamma).
\end{aligned}
\tag{4.62}
$$

さて，ベクトル $|\psi\rangle$ を球面上のあるループ C に沿って平行移動させて，元へ戻ったときの角度のズレ

$$
\gamma(C) = \oint_C d\gamma \tag{4.63}
$$

を計算しよう．まず，(4.62) から

$$
\begin{aligned}
\langle n|dn\rangle &= \langle\psi|\exp(-i\gamma)\{id\gamma|\psi\rangle\exp(i\gamma) + d|\psi\rangle\exp(i\gamma)\} \\
&= id\gamma + \langle\psi|d\psi\rangle
\end{aligned}
\tag{4.64}
$$

となる．平行移動条件 (4.58) は，上式の第 2 項が消えることを意味する．したがって，

$$
d\gamma = -i\langle n|dn\rangle \tag{4.65}
$$

となる．これから，角度のズレは

$$
\begin{aligned}
\gamma(C) &= \mathrm{Im}\oint_C \langle n|dn\rangle \\
&= \mathrm{Im}\iint_S \langle dn| \times |dn\rangle
\end{aligned}
\tag{4.66}
$$

と表現できる．上式 2 行目では Stokes の定理を用いた．また，閉曲線 C で囲まれる曲面を S と書いた．

(4.66) を具体的に球面座標 (θ, ϕ) で書き直すと，

$$
\begin{aligned}
\gamma(C) &= \mathrm{Im}\iint_S d\theta d\phi \left(\left\langle \frac{\partial n}{\partial\theta}\middle|\frac{\partial n}{\partial\phi}\right\rangle - \left\langle \frac{\partial n}{\partial\phi}\middle|\frac{\partial n}{\partial\theta}\right\rangle\right) \\
&= \iint_S d\theta d\phi\,\sin\theta \\
&= \iint_S d\Omega
\end{aligned}
\tag{4.67}
$$

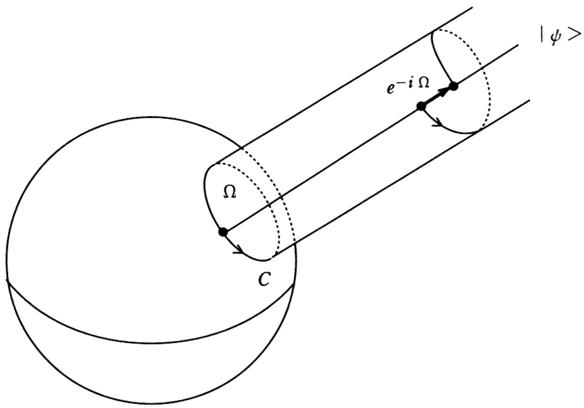


図 4-11 単位球面上でのベクトルの平行移動による角度のズレの大きさは Ω (移動の径路が囲む球面の部分の面積) である．

が得られる．ここで，2 行目へ移るのに (4.59) と (4.61) を用いた．結局，角度のズレはちょうどループが囲む面積に等しくなる．なお，基底ベクトルの変換は

$$|n(\theta,\phi)\rangle \longrightarrow |n'(\theta,\phi)\rangle = |n(\theta,\phi)\rangle \exp(i\alpha(\theta,\phi)) \tag{4.68}$$

ということだから，最終結果に影響を与えない．これは，(4.66) の表式から明らかである．ファイバー束での状況は図 4-11 のようになる．

4-3-3 Aharonov-Anandan の位相

まず最初に 1 つの例を調べることにする．ハミルトニアン

$$H = -\bar{B}\sigma_3 \tag{4.69}$$

に従って時間発展する系を考える．時刻 $t=0$ において，我々の系の状態は

$$u(t=0) = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

であるとする．その後の時刻 t においては，この状態は

$$u(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)u(0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\bar{B}t\sigma_3\right)u(0)$$

であり，具体的に計算すると

$$u(t) = \begin{pmatrix} \exp\left(\dfrac{i}{\hbar}\bar{B}t\right)\cos\dfrac{\theta}{2} \\ \exp\left(-\dfrac{i}{\hbar}\bar{B}t\right)\sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{4.70}$$

となる．この状態での σ_3 の期待値は

$$u^\dagger(t)\sigma_3 u(t) = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \cos\theta$$

となる．したがって，この波動関数は第 3 軸との角度を θ に保ちながら回転しているスピンの状態に対応していると見なせる．

さてここで，表式 (4.70) と第 4-1-5 項の例に出てきた波動関数

$$u_1(t) = \begin{pmatrix} e^{i\omega t}\cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

との類似性に注目しよう．特に，$\bar{B}/\hbar = \omega/2$ とおくと，

$$u(t) = \exp\left(-\frac{i}{2}\omega t\right)u_1(t)$$

という関係がある．したがって，$u(t)$ は $u_1(t)$ と同様に 4-1-5 項のハミルトニアンの固有ベクトルであるが，以前は $u_n\ (t = 2\pi/\omega) = u_n\ (t = 0), n = 1, 2$ という要請をしたのである．今の場合，波動関数 $u(t)$ はハミルトニアン (4.69) に対する Schroödinger 方程式の近似なしの解である．

さて，Aharonov と Anandan は次のようなファイバー束 E，つまり (E, π, F, G, M) を問題の舞台として考察する：

ファイバー F は規格化された状態ベクトルの空間 $\mathcal{H}$ とする．底空間 M への射影 π は，$\mathcal{H}$ の要素 ψ に対して

$$\pi(\psi) = \{\psi'; \psi' = c\psi, c \in U(1)\}$$

とする．つまり，底空間 M は長さが 1 の波動関数から位相部分の差異を無視したものの空間である．$M = \mathcal{H}/U(1)$．これは $\mathcal{H}$ の射線 (ray) の空間とも呼ばれている．構造群 G は $U(1)$ で，絶対値が 1 の複素数 $\exp(i\theta)$ を波動関数に位相因子として乗算する群である．

この舞台の中で，上の波動関数 $u(t)$ を考えよう．この波動関数は時刻とともにファイバー束 E の中で曲線 $\bar{C}$ を描く．この曲線を低空間 M へ射影したものを C とする．このとき，低空間 M の曲線 C は時間 $\tau \equiv 2\pi/\omega$ の後には出発点に戻り，曲線 C は閉曲線になる．しかし，E の中の曲線 $\bar{C}$ は閉じてはいない．そこで，$u\ (t = 0)$ と $u\ (t = \tau)$ との位相差 ϕ を計算してみよう．明らかに

$$u(\tau) = \exp(i\pi)u(0)$$

である．この全位相差 $\phi\ (= \pi)$ から通常の力学的時間発展の部分

$$\begin{aligned}\phi_d &= -\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau u^\dagger(t)Hu(t)\,dt \\ &= -\frac{1}{\hbar}(-\overline{B}\cos\theta)\tau = \pi\cos\theta\end{aligned}$$

を取り去って，$\phi = \phi_d + \gamma$ とした残りの部分 γ は

$$\begin{aligned}\gamma &= \pi(1 - \cos\theta) \\ &= -\pi(1 + \cos\theta), \qquad \mathrm{mod}\ 2\pi\end{aligned}$$

となり，これは 4-1-5 項で計算したものと一致する．この結果は，位相 γ がハミルトニアンに依存するというよりもむしろ，波動関数がファイバー束の中をどう時間発展していくかによっていることを示している．

一般的には，状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ に対して新しい波動関数を

$$|\phi(t)\rangle = e^{i\gamma(t)}|\psi(t)\rangle,$$
$$\gamma(t) = i\int_0^t \langle\psi(t')|\dot{\psi}(t')\rangle\, dt',$$

と定義して，この波動関数 $|\phi(t)\rangle$ が上のファイバー束の中を移動していく様子を考える．今の場合 $|\psi(t)\rangle$ は Schrödinger 方程式に従って正確に時間発展していくので，

$$\begin{aligned}\gamma(t) &= \frac{1}{\hbar}\int_0^t \langle\psi(t')|H|\psi(t')\rangle\, dt' \\ &= \frac{1}{\hbar}\int_0^t E(t')\, dt'\end{aligned}$$

となる．したがって，元の波動関数 $|\psi(t)\rangle$ から通常の力学的時間発展の位相を取り除いたものが $|\phi(t)\rangle$ である．この新しい波動関数 $|\phi(t)\rangle$ の時間発展は，簡単な計算ですぐわかるように

$$\langle\phi(t)|\dot{\phi}(t)\rangle = 0$$

という条件に従う．これが今の場合，ファイバー束の中での平行移動条件である．波動関数 $|\phi(t)\rangle$ は，この条件に従って時間とともにいわば幾何学的な位相を獲得しながら発展していくものと見なせる．

そこで今，$\pi\left(|\phi\rangle\right)$ がファイバー束の底空間 M の中で閉曲線 C を描いたとする．そしてまた，このとき $|\phi\rangle$ は E の中では，出発点からの平行移動によって描かれる曲線 $\bar{C}$ に沿って時間発展してきたとする．このとき一般には曲線 $\bar{C}$ は閉じているとは限らない．この一般には閉じているとは限らない曲線 $\bar{C}$ の両端における $|\phi\rangle$ の位相差が Aharonov-Anandan の位相である [14]．つまり，この位相はここで考えているファイバー束におけるホロノミー群の要素として捉えられるものである．

Aharonov-Anandan の位相は，もちろん Berry の位相の拡張であるが，次の点に特徴がある：まず，断熱定理が成立するための条件が不要である．つまり，断熱過程以外の場合にも適用できる．特に準位の縮退が生じてもかまわない．次に，Berry の位相の場合と違って，ハミルトニアンがある時間の後にもとに戻るという必要はない．特に，ハミルトニアンに現れる時間依存

のパラメタ $\vec{R}$ が，ループを描いてある時間の後にもとに戻るという状況に考察を限定する必要はない．

4-4 節　Berry の位相の具体例

4-4-1　2 準位系

Berry の位相の表式 (4.33)，(4.34) からすぐわかるように，もっとも簡単な非自明の Berry の位相は，エネルギー準位を 2 つだけ持つ系で生ずる．あるいは，次のように考えることもできる．今注目している系の状態が固有値番号 m とすると，式 (4.34) での和に対する最大の寄与は，エネルギー差の分母のために，E_m にもっとも近いエネルギーを持つ準位からくる．それを固有値番号 $(m+1)$ とする．もしパラメタ $\vec{R}$ が，$E_m \approx E_{m+1}$ となるような値になっておれば (そして，パラメタ空間中のループ C がこのエネルギー縮退を引き起こす $\vec{R}$ の点に近いところを回っておれば)，問題となる 2 つの準位 E_m と E_{m+1} だけを考慮に入れるだけで十分よい近似となるだろう．

縮退したときのエネルギー値をエネルギーの基準点，つまりゼロとする．また，パラメタ $\vec{R}$ の座標系についても，この縮退を引き起こす点を原点と定義し直すことにしよう．

ハミルトニアン $H(\vec{R})$ を $\vec{R}=0$ のまわりで Taylor 展開すると，

$$H(\vec{R}) = H(0) + \vec{\nabla} H(0) \cdot \vec{R} + O(R^2)$$

である．仮定により，$H(0) = 0$ である．今考えているのは 2 準位だけなので，この $H(\vec{R})$ は 2 次元 Hilbert 空間の Hermite 作用素である (つまり，2 つの準位を結び付ける作用素で，固有値が実数になるものである)．展開式の第 3 項を無視すると，

$$H(\vec{R}) = \vec{\sigma} \cdot \vec{R} \tag{4.71}$$

が一般的な形である．この段階で，$\vec{R}$ は実 3 次元ベクトルとした．なお，(4.71) の右辺において単位行列の項を無視した．この項は以下の議論に影響を与えないからである．ここで，

$$\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$$

は Pauli スピン行列である．この行列は，

$$\frac{1}{2}\vec{\sigma} \times \frac{1}{2}\vec{\sigma} = i\frac{1}{2}\vec{\sigma} \tag{4.72}$$

という性質を持っている．

ハミルトニアン (4.71) の固有値は

$$\det(H - E \cdot 1) = E^2 - (R_1^2 + R_2^2 + R_3^2) = 0 \tag{4.73}$$

により，

$$E = \pm(R_1^2 + R_2^2 + R_3^2)^{1/2} \equiv \pm R \tag{4.74}$$

である．

さて，Berry の位相を計算するために，式 (4.34) において

$$E_m = E_1 = +R, \quad E_{m+1} = E_2 = -R \tag{4.75}$$

と選び，対応する状態を $|1\rangle, |2\rangle$ と書く．

例えば，

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{4.76}$$

とおくと，

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} \cdot \vec{R}|1\rangle &= \begin{pmatrix} R_3 & R_1 - iR_2 \\ R_1 + iR_2 & -R_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \\ &= E_1|1\rangle = R \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{4.77}$$

および規格化条件

$$\langle 1|1\rangle = |u|^2 + |v|^2 = 1 \tag{4.78}$$

から

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2R(R-R_3)}}\begin{pmatrix} R_1 - iR_2 \\ R - R_3 \end{pmatrix} \tag{4.79}$$

が得られる．

計算したい量は

$$\vec{V}_1(\vec{R}) = \mathrm{Im}\frac{1}{4R^2}\langle 1|\vec{\sigma}|2\rangle \times \langle 2|\vec{\sigma}|1\rangle, \tag{4.80}$$

$$\vec{V}_2(\vec{R}) = \mathrm{Im}\frac{1}{4R^2}\langle 2|\vec{\sigma}|1\rangle \times \langle 1|\vec{\sigma}|2\rangle \tag{4.81}$$

である．この 2 つの式から直ちに

$$\vec{V}_2(\vec{R}) = -\vec{V}_1(\vec{R}) \tag{4.82}$$

がわかる．さて，式 (4.80) は次のように書ける：

$$\vec{V}_1(\vec{R}) = \mathrm{Im}\frac{1}{4R^2}\sum_{n=1}^{2}\langle 1|\vec{\sigma}|n\rangle \times \langle n|\vec{\sigma}|1\rangle. \tag{4.83}$$

$|n\rangle = |1\rangle$ は上式に寄与しないので，こう書いてよいわけだが，ここで，完全性関係式

$$\sum_{n=1}^{2}|n\rangle\langle n| = 1 \tag{4.84}$$

を用いると，

$$\vec{V}_1(\vec{R}) = \mathrm{Im}\frac{1}{4R^2}\langle 1|\vec{\sigma}\times\vec{\sigma}|1\rangle \tag{4.85}$$

が得られる．したがって，(4.72) により

$$\vec{V}_1(\vec{R}) = \frac{1}{2R^2}\langle 1|\vec{\sigma}|1\rangle \tag{4.86}$$

となる．

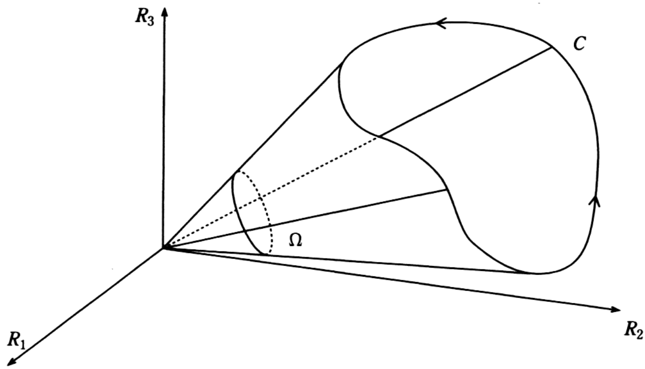


図 4-12　$\vec{R}$ が描く閉曲線 C およびそれを原点から見る立体角 Ω.

Pauli スピン行列 (4-1-5 項) に対して状態ベクトル $|1\rangle$ の表式 (4.79) を用いて計算すると直ちに

$$\langle 1|\vec{\sigma}|1\rangle = \frac{\vec{R}}{R} \tag{4.87}$$

が得られる．

結局，(4.87) を (4.86) へ代入して

$$\vec{V}_1(\vec{R}) = \frac{\vec{R}}{2R^3} \tag{4.88}$$

が結論できる．したがって，Berry の位相は

$$\begin{aligned}\gamma_1(C) &= -\iint_S \frac{\vec{R}}{2R^3}\cdot d\vec{S} \\ &= -\iint_S \frac{1}{2R^2} R^2\, d\Omega \\ &= -\frac{1}{2}\Omega(C)\end{aligned} \tag{4.89}$$

となる．ここで，$\Omega(C)$ は $\vec{R}$ 空間の原点から (境界を C とする) 曲面 S を見る立体角である (図 4-12).

ここで，4-2 節の注意 3 で示した「ベクトル・ポテンシャル」(4.36) を，状態 $|1\rangle$ の表式 (4.79) に対して計算すると

$$\vec{A}(\vec{R}) = i\langle 1|\vec{\nabla}|1\rangle$$
$$= \left(-\frac{R_2}{2R(R-R_3)}, \frac{R_1}{2R(R-R_3)}, 0\right) \tag{4.90}$$

となる．これはちょうど，(2.60) で $g=-1/2$ とした場合に対応している．つまり，我々の系はパラメタ空間の原点に「磁荷 $-1/2$ 」の「磁気単極子」を持っている．このことは，(4.88) を見てもわかることである．なお，$\gamma_m(C)$ と $\vec{V}_m(\vec{R})$ で符号がずれていることを考慮する．

状態の表式の位相を変更して

$$|1\rangle \longrightarrow |1\rangle' = \frac{\sqrt{R^2-R_3^2}}{R_1-iR_2}\cdot|1\rangle \tag{4.91}$$

とすると，この場合の「ベクトル・ポテンシャル」は (2.50) に対応するものとなる．

4-4-2 磁場中のスピン

前節のハミルトニアン (4.71) の拡張として

$$H(\vec{R}) = \vec{J}\cdot\vec{R} \tag{4.92}$$

を考えよう．3 次元ベクトル $\vec{J}$ はスピン角運動量作用素で，$2J+1$ 個の固有ベクトル $|J,M\rangle$ で張られる空間に作用する：

$$\vec{J}\cdot\vec{J}|J,M\rangle = J(J+1)|J,M\rangle, \quad J = \text{整数または半奇数}$$
$$J_3|J,M\rangle = M|J,M\rangle, \quad M=-J,-J+1,\ldots,J-1,J \tag{4.93}$$

ここで 3 次元パラメタ $\vec{R}$ は磁場 $\vec{B}$ であると思うと，(4.92) は磁場中のスピンの運動を記述するハミルトニアンである．表式 (4.34) からわかるように，ハミルトニアン (4.92) を定数倍しても Berry の位相は変化しないので，ここでは簡単に係数は 1 としておく．あるいは，$\vec{R}$ を $\vec{B}$ に読み替えるときに係数を持ち込めばよい．

[1] 角運動量作用素

ここで問題としている Hermite 作用素 $\vec{J}$ を特徴づける式は

$$\vec{J}\times\vec{J} = i\vec{J} \tag{4.94}$$

である．(4.94) から

$$[\vec{J}\cdot\vec{J}, J_k] = 0, \quad k = 1,2,3 \tag{4.95}$$

が導ける ($[A,B] \equiv AB - BA$ は作用素 A と B の交換子である).

したがって，$\vec{J}\cdot\vec{J}$ と J_3 の同時固有状態を考えることができる．それを (4.93) と書くわけである．今さしあたりここでは $\vec{J}\cdot\vec{J}$ の固有値を Λ, J_3 の固有値を M としておこう．

$$\vec{J}\cdot\vec{J} - J_3^2 = J_1^2 + J_2^2 \geqq 0 \tag{4.96}$$

という不等式から，J_3 の固有値 M には，$\vec{J}\cdot\vec{J}$ の固有値 Λ に応じて上限 M_+ と下限 M_- があることがわかる．昇降演算子を

$$J_\pm = J_1 \pm iJ_2 \tag{4.97}$$

と定義すると，(4.94) により

$$[J_3, J_\pm] = \pm J_\pm \tag{4.98}$$

となる．この関係式 (4.98) の両辺を $|J,M\rangle$ に作用させると

$$\begin{aligned} J_+|J,M\rangle &\propto |J,M+1\rangle, \\ J_-|J,M\rangle &\propto |J,M-1\rangle \end{aligned} \tag{4.99}$$

が結論できる．さらに，(4.94) から出てくる次の関係式

$$\begin{aligned} J_-J_+ &= \vec{J}\cdot\vec{J} - J_3^2 - J_3, \\ J_+J_- &= \vec{J}\cdot\vec{J} - J_3^2 + J_3 \end{aligned} \tag{4.100}$$

を利用すると，

$$\begin{aligned} J_-J_+|J,M_+\rangle &= 0 \\ &= (\vec{J}\cdot\vec{J} - J_3^2 - J_3)|J,M_+\rangle \\ &= (\Lambda - M_+^2 - M_+)|J,M_+\rangle, \\ J_+J_-|J,M_-\rangle &= 0 \\ &= (\vec{J}\cdot\vec{J} - J_3^2 + J_3)|J,M_-\rangle \\ &= (\Lambda - M_-^2 - M_-)|J,M_-\rangle \end{aligned} \tag{4.101}$$

となり，

$$\Lambda - M_+^2 - M_+ = 0, \quad \Lambda - M_-^2 + M_- = 0 \tag{4.102}$$

が得られる．(4.102) から

$$M_+ = -M_- \tag{4.103}$$

が結論できる．そこで，

$$M_+ = +J, \quad M_- = -J \tag{4.104}$$

という式で，数 J を定義する．そうすると，(4.102) から

$$\Lambda = J(J+1) \tag{4.105}$$

が導出できる．

J_3 の一番小さい固有状態 $|\Lambda, M_-\rangle$ に (4.97) の J_+ を作用させて，$|\Lambda, M_- + 1\rangle$ を作り，順次 $|\Lambda, M_- + 2\rangle, \ldots, |\Lambda, M_+ - 1\rangle, |\Lambda, M_+\rangle$ という具合に合計 $(M_+ - M_-) = 2J$ のステップで，固有値 Λ に属する固有ベクトルが生成できる．したがって，$2J$ は整数値をとる．

以上により，(4.93) が得られる．なお，(4.100) を利用して，(4.99) が正確には

$$\begin{aligned} J_+|J, M\rangle &= \sqrt{J(J+1) - M(M+1)}|J, M+1\rangle, \\ J_-|J, M\rangle &= \sqrt{J(J+1) - M(M-1)}|J, M-1\rangle \end{aligned} \tag{4.106}$$

となることが計算できる．これから，(4.97) を用いて J_1 と J_2 の作用も計算できる．

[2] ハミルトニアン $H = \vec{J} \cdot \vec{R}$ の固有ベクトル

角運動作用素は空間回転の生成元である．特に，

$$J'_k = \exp(i\omega\vec{e} \cdot \vec{J}) J_k \exp(-i\omega\vec{e} \cdot \vec{J}), \quad |\vec{e}| = 1, \quad k = 1, 2, 3 \tag{4.107}$$

という式で，$\vec{J}'$ を定義すると，これは $\vec{e}$ 方向を軸としてベクトル $\vec{J}$ を角度 ω だけ回転したものとなる (図 4-13).

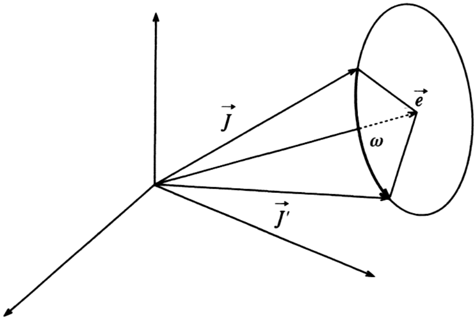


図 4-13　$\vec{e}$ を軸として $\vec{J}$ を角度 ω だけ回転すると $\vec{J}'$ となる.

例として,

$$\vec{e} = (0, 0, 1)$$

の場合を計算してみよう. このとき, 次の公式を利用する:

$$e^{iA}Be^{-iA} = B + i[A,B] + \frac{i^2}{2!}[A,[A,B]] + \cdots + \frac{i^n}{n!}[A,[A,\cdots,[A,B]]] + \cdots . \tag{4.108}$$

[この公式の証明は, 例えば次のようにすればよい:

$$F(t) = e^{iAt}Be^{-iAt}$$

という関数を考える. この式を $t = 0$ のまわりで Taylor 展開して, その後 $t = 1$ とおく.

$$F'(t) = ie^{iAt}[A,B]e^{-iAt}$$

というような式が出てくるので, (4.108) が得られるわけである].

さて, $\vec{J}$ の基本的性質 (4.94) を用いて次のように計算できる:

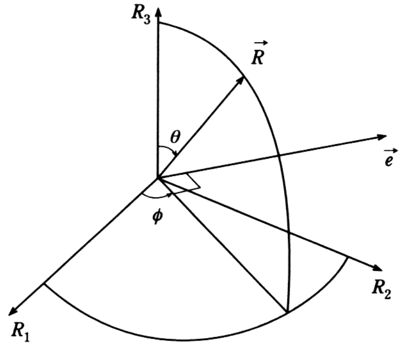


図 4-14　$\vec{e}$ の回りに角度 θ 回転すると，R_3 軸が $\vec{R}$ の方向を向く．

$$
\begin{aligned}
J_1' &= e^{i\omega J_3} J_1 e^{-i\omega J_3} \\
&= J_1 + i\omega[J_3, J_1] + \frac{(i\omega)^2}{2!}[J_3, [J_3, J_1]] + \cdots \\
&= J_1 \cos\omega - J_2 \sin\omega, \\
J_2' &= e^{i\omega J_3} J_2 e^{-i\omega J_3} \\
&= J_2 + i\omega[J_3, J_2] + \frac{(i\omega)^2}{2!}[J_3, [J_3, J_2]] + \cdots \\
&= J_2 \cos\omega + J_1 \sin\omega, \\
J_3' &= e^{i\omega J_3} J_3 e^{-i\omega J_3} \\
&= J_3.
\end{aligned}
$$

したがって，

$$
\begin{pmatrix} J_1' \\ J_2' \\ J_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\omega & -\sin\omega & 0 \\ \sin\omega & \cos\omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \end{pmatrix} \tag{4.109}
$$

となっている．さて，$\vec{e}$ のまわりに角度 θ だけ回転すると，R_3 が $\vec{R}$ の方向を向くように $\vec{e}$ を選ぶことにする (図 4-14).

このとき，

$$
e^{i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}}(\vec{R}\cdot\vec{J})e^{-i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}} \tag{4.110}
$$

を計算しよう．ここで，

$$R = |\vec{R}| \tag{4.111}$$

とする．$\vec{R}$ と $\vec{J}$ に対して同じ回転を作用させれば，それらの内積 $\vec{R}\cdot\vec{J}$ は不変であるが，(4.110) の回転の作用は $\vec{J}$ だけに働く (この場合，$\vec{R}$ は定数ベクトルで $\vec{J}$ の作用を受けないとしている)．したがって，(4.110) 式は

$$\vec{R}\cdot\vec{J}' \tag{4.112}$$

となる．ここで，$\vec{J}'$ は $\vec{J}$ を $\vec{e}$ のまわりに角度 θ 回転したものである．(4.112) において，今度は $\vec{R}$ と $\vec{J}'$ 両方を $\vec{e}$ のまわりに角度 $(-\theta)$ 回転させる．そうすると，$\vec{R}$ は第 3 軸の方向を向き，$\vec{J}'$ は元の $\vec{J}$ へ戻る．このとき (4.112) の値は不変であるが，表式は

$$RJ_3 \tag{4.113}$$

となる．

ハミルトニアン (4.92) $H(\vec{R}) = \vec{J}\cdot\vec{R}$ の固有ベクトルは次の形に書ける：

$$|J, M(\vec{R})\rangle = e^{-i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}}|J, M\rangle. \tag{4.114}$$

なぜならば，実際に (4.92) を (4.114) に作用させてみると，

$$\begin{aligned} &\vec{R}\cdot\vec{J}|J, M(\vec{R})\rangle \\ &= e^{-i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}}(e^{+i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}}\vec{R}\cdot\vec{J}e^{-i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}})|J, M\rangle. \end{aligned} \tag{4.115}$$

であるが，(4.110) と (4.113) により，

$$e^{i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}}\vec{R}\cdot\vec{J}e^{-i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}} = RJ_3 \tag{4.116}$$

であるから，

$$\vec{R}\cdot\vec{J}|J, M(\vec{R})\rangle = RM|J, M(\vec{R})\rangle \tag{4.117}$$

となるからである．したがって，ハミルトニアン $H(\vec{R})$ の固有値は

$$E_M = RM, \quad M = -J, -J+1, \cdots, J-1, J \tag{4.118}$$

である．

次に，これらの固有状態 $|J, M(\vec{R})\rangle$ に $\vec{J}$ が作用すると，どうなるかを考えてみよう：

$$\begin{aligned}\vec{J}|J, M(\vec{R})\rangle &= e^{-i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}}(e^{i\theta\cdot\vec{J}}\vec{J}e^{-i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}})|J, M\rangle \\ &= e^{-i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}}\vec{J}'|J, M\rangle\end{aligned} \tag{4.119}$$

となる．ここで，$\vec{J}'$ は以前に (4.112) に現れているものと同じであり，$\vec{J}$ の線形結合で表せる．ところで，(4.97)，(4.106) により，J_1 と J_2 は $|J, M\rangle$ の M の値を 1 だけ変化させ，また，(4.93) より J_3 は M の値を変化させないことがわかる．したがって，(4.119) の右辺の

$$\vec{J}'|J, M\rangle$$

は

$$|J, M-1\rangle, \quad |J, M\rangle, \quad |J, M+1\rangle$$

の線形結合となる．つまり，$\vec{J}$ はエネルギー固有値を高々1 単位 (つまり，$1 \cdot R$) 変えうるだけである．

$\vec{J}$ の期待値を計算しよう．まず

$$\begin{aligned}\langle J, M(\vec{R})|\vec{J}|J, M(\vec{R})\rangle &= \langle J, M|e^{i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}}\vec{J}e^{-i\theta\vec{e}\cdot\vec{J}}|J, M\rangle \\ &= \langle J, M|\vec{J}'|J, M\rangle\end{aligned} \tag{4.120}$$

である．$\vec{J}'$ は上にも述べたように，J_1, J_2, J_3 の線形結合であるが，(4.120) に寄与するのは J_3 の部分だけである．$\vec{e}$ のまわりに角度 θ 回転させる［式 (4.109) のような］ 3×3 の行列を L_{ij} $(i, j = 1, 2, 3)$ と書くと，

$$J'_i = \sum_{j=1}^{3} L_{ij} J_j \tag{4.121}$$

である．今必要なのは L_{i3} $(i = 1, 2, 3)$ である．この要素 L_{i3} はちょうど

$$x'_i = \sum_{j=1}^{3} L_{ij} x_j \tag{4.122}$$

という一般の変換式で，変換前のベクトルを

$$x = (0, 0, 1) \tag{4.123}$$

としたときの変換後のベクトル

$$x'_i = L_{i3} \tag{4.124}$$

である．したがって，図 4-14 からわかるように，L_{i3} は $\vec{R}$ 方向の単位ベクトルの成分である：

$$\begin{aligned} L_{i3} &= (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) \\ &= \frac{\vec{R}}{R}. \end{aligned} \tag{4.125}$$

結局，式 (4.120)，(4.121)，(4.125) から

$$\langle J, M(\vec{R})|J_i|J, M(\vec{R})\rangle = L_{i3}\langle J, M|J_3|J, M\rangle = ML_{i3}, \tag{4.126}$$

つまり，

$$\langle J, M(\vec{R})|\vec{J}|J, M(\vec{R})\rangle = M\frac{\vec{R}}{R} \tag{4.127}$$

となる．

[3]　Berry の位相の計算

さていよいよ，Berry の位相を計算しよう．まず，(4.34) の $\vec{V}_M(\vec{R})$ を計算する．

$$\vec{V}_m(\vec{R}) = \mathrm{Im}\sum_{n\neq m}\frac{\langle m(\vec{R})|\vec{\nabla}H|n(\vec{R})\rangle \times \langle n(\vec{R})|\vec{\nabla}H|m(\vec{R})\rangle}{(E_n - E_m)^2}. \tag{4.34}$$

ここでは，上式の m を M，n を N と読み直すこととする．

ハミルトニアン (4.92) から

$$\vec{\nabla} H(\vec{R}) = \vec{J} \tag{4.128}$$

となる．上述第 2 項の末尾のところ［式 (4.119) あたり］の結果から，(4.34) の分母のエネルギー差としては

$$|E_N - E_M| = R \tag{4.129}$$

となるものだけが現れる．したがって，

$$\vec{V}_M(\vec{R}) = \mathrm{Im}\frac{1}{R^2}\sum_{N \neq M}\langle M(\vec{R})|\vec{J}|N(\vec{R})\rangle \times \langle N(\vec{R})|\vec{J}|M(\vec{R})\rangle \tag{4.130}$$

となるが，この段階で和に $N = M$ の項を付け加えても，この項はゼロだからいっこうに差し支えない：

$$\vec{V}_M(\vec{R}) = \mathrm{Im}\frac{1}{R^2}\sum_{N}\langle M(\vec{R})|\vec{J}|N(\vec{R})\rangle \times \langle N(\vec{R})|\vec{J}|M(\vec{R})\rangle. \tag{4.131}$$

ここで完全性関係式を用いると，

$$\vec{V}_M(\vec{R}) = \mathrm{Im}\frac{1}{R^2}\langle M(\vec{R})|\vec{J} \times \vec{J}|M(\vec{R})\rangle \tag{4.132}$$

が得られる．角運動量作用素 $\vec{J}$ の基本性質 (4.94) を用いると

$$\vec{V}_M(\vec{R}) = \frac{1}{R^2}\langle M(\vec{R})|\vec{J}|M(\vec{R})\rangle \tag{4.133}$$

となる．(4.127) を用いて

$$\vec{V}_M(\vec{R}) = \frac{M\vec{R}}{R^3} \tag{4.134}$$

が結論できる．(4.33) に (4.134) を代入して

$$\begin{aligned}\gamma_M(C) &= -\iint_S \frac{M\vec{R}}{R^3} \cdot d\vec{S} \\ &= -M\Omega(C)\end{aligned} \tag{4.135}$$

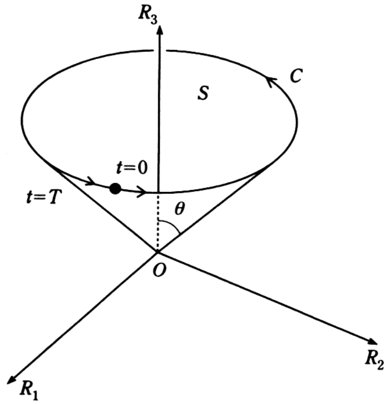


図 4-15　C を境界とする曲面 S を原点から見る立体角は $2\pi(1-\cos\theta)$ である．

となる．ここで，4-4-1 項と同じく $\Omega(C)$ は $\vec{R}$ 空間の原点から (境界を C とする) 曲面 S を見る立体角である (図 4-12).

パラメタ $\vec{R}$ が時間的に変化する磁場

$$\vec{R}(t) = B(\sin\theta\cos\phi(t), \sin\theta\sin\phi(t), \cos\theta)$$

の場合には，

$$\phi(0) = 0, \quad \phi(T) = 2\pi$$

とすると

$$\Omega(C) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\theta} d\theta' \sin\theta' = 2\pi(1-\cos\theta)$$

である (図 4-15).

注意 1

$\vec{R} = (0,0,R)$ と選ぶと，$|J, M(\vec{R})\rangle = |J, M\rangle$ となる．この場合に (4.34) を直接計算すると［(4.93)，(4.106) を利用する］，

$$(V_M)_1 = 0, \quad (V_M)_2 = 0, \quad (V_M)_3 = \frac{M}{R^2}$$

が求まる．これから，理論がパラメタ空間のどの方向も特別扱いしていないことを考慮して，(4.134) を結論することができる．

注意 2

$\vec{R} = (0,0,R)$ の近傍で式 (4.114) を用いて，(4.28) から $\gamma_M(C)$ を計算することもできる．

4-4-3　実験例

Berry の位相を観測する実験例を示そう．対象とする粒子を光子とし，その光子の運動量を $\vec{p}$，スピン角運動量を $\vec{J}$ と書く．断熱的に変化するパラメタ $\vec{R}$ を $\vec{p}/|\vec{p}|$ とする．このときハミルトニアン (4.92) は

$$H = \vec{J} \cdot \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|} \tag{4.136}$$

となる．このハミルトニアンは光子のスピン角運動量の運動量方向の成分であり，ヘリシティと呼ばれている量である．光子のスピンの大きさは 1 であり，光子のヘリシティは $+1$ または -1 である．

さて，光学ファイバーを螺旋状に，例えば円柱にでも，巻き付けて図のようにする (図 4-16a)［一定のピッチの規則的な螺旋とは限らない．螺旋状で滑らかならばそれでよい］．

この光学ファイバー中に光を一方の端から送り込んで，他端から出てくる光を調べる．光学ファイバーに入射する方向と，そこから出てくる光の進行方向とは同一になるようにしておく．そうすると，パラメタ $\vec{R} = \vec{p}/|\vec{p}|$ は図 4-16b のようなループを描くことになり，そのループが原点を見込む立体角 $\Omega(C)$ は計算できる量である．

光学ファイバーへ入射する時刻での，ヘリシティ ± 1 の光の固有状態を $|\pm 1\rangle$ と書くことにすると，光学ファイバーから出てくる時刻での対応する光の状態は，前節の結果により

$$|\pm 1\rangle' = e^{i\Theta} e^{\mp i\Omega(C)} |\pm 1\rangle \tag{4.137}$$

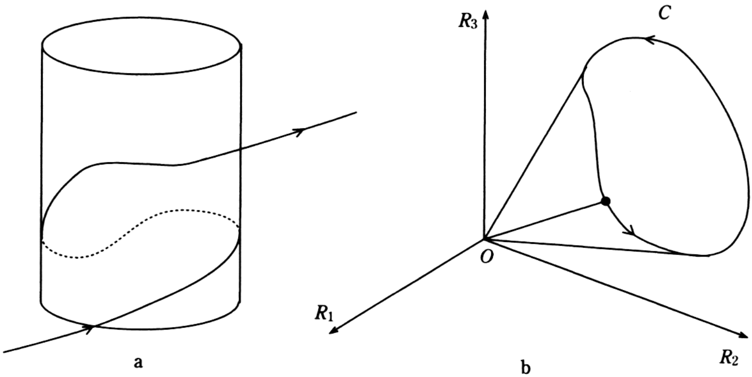


図 4-16　a：光学ファイバーを円柱に巻き付ける．b：光子は $\vec{R}=\vec{p}/|\vec{p}|$ 空間中のループ C を描く．

である．ここで，Θ はエネルギーによる通常の時間発展の位相である．前項 4-4-2 で注意したようにハミルトニアン H を定数倍しても Berry の位相 $\Omega(C)$ には影響が生じない．そこで，ハミルトニアンは

$$H=\varepsilon\vec{J}\cdot\frac{\vec{p}}{|\vec{p}|} \tag{4.138}$$

で，ε が非常に小さい，0 に近い量とすると，Θ はヘリシティの値にほとんど依存せず，状態 $|\pm 1\rangle$ に共通の量となる．

さて，入射する光が直線的に偏光している，つまり入射する光の状態が，例えば

$$\frac{|+1\rangle+|-1\rangle}{\sqrt{2}} \tag{4.139}$$

であるとしよう．このとき，出てくる光の状態は，(4.137) から

$$\begin{aligned}&\frac{|+1\rangle'+|-1\rangle'}{\sqrt{2}}\\&=e^{i\Theta}\left(\cos\Omega(C)\frac{|+1\rangle+|-1\rangle}{\sqrt{2}}+\sin\Omega(C)\frac{|+1\rangle+|-1\rangle}{\sqrt{2}i}\right)\end{aligned} \tag{4.140}$$

となる．この結果は，偏光面が角度 $\Omega(C)$ だけ回転することを意味する．実際の実験では，この回転角が種々の形状 (規則的および不規則的) の螺旋のファイバーに対して測定されて，非常によく理論と一致する結果が得られている [15].

この実験は明瞭でわかりやすく，その点ではよいけれども，本当に Berry の位相の存在の証明になっているかというと，問題がある．まず，ハミルトニアン (4.138) の根拠がよくわからない．次に，実際の観測は古典論的な光の実験なので，多量の光子を対象としており，Maxwell 理論の守備範囲の現象である，ということがある．実際，偏光面の回転の現象は，Maxwell の電磁気理論でも説明できるのである [16].

このような状況にも関わらず，この実験を紹介したのは，その単純さのためである．しかし，この実験と同様の光学実験でかつ 1 フォトンのレベルで Berry の位相が確認されている [17].

また他の分野でも，Berry の位相を観測しようとする多くの実験がある．それらについては，まず [18] の第 4 章を参照するとよいだろう．この論文集 [18] には初期の代表的な論文が 40 編余り収録されている．

4-5 節　ゲージ・ポテンシャル

ここまでの議論では，物理系の力学変数 q に対して，断熱パラメタ $\vec{R}$ は外部変数であり，ある与えられたものであるとして取り扱ってきた．しかし，$\vec{R}$ も力学変数でありうる．つまり，今問題の力学系は 2 種類の力学的変数 q と R を含み，R は q よりはるかにゆっくりと変化する，という状況が存在する．この節では，最後の具体例以外は，q と R の自由度は任意である．しかし，これらの自由度を区別する下添字等は省略する．例えば，分子の問題において，R は重い原子核の座標であり，q は軽くて早く変化する電子の座標である［断熱定理を適用してこの問題を取り扱ったのが Born-Oppenheimer 理論である］.

軽くて早く変化する系 (q) と重くてゆっくり変化する系 (R) が結合し相互作用する場合の全系のラグランジアンを

$$L_T = \frac{1}{2}M\dot{R}^2 + L(q, \dot{q}; R) \tag{4.141}$$

と書く．ここで，$L(q, \dot{q}; R)$ は遅い座標を一定とした場合の軽い系のラグランジアンである．つまり，$L(q, \dot{q}; R)$ は前節まで考察の対象としてきた系のラグランジアンである．R のポテンシャル・エネルギーは L に含めておく．(4.141) に対応するハミルトニアンを

$$H_T = \frac{1}{2M}P^2 + H(q, p, R) \tag{4.142}$$

と書く．運動量 p と P はそれぞれ q と R に共役のものである．

速い系の固有状態 $|n(R)\rangle$ は (4.4) で

$$H(q, p; R)|n(R)\rangle = E_n(R)|n(R)\rangle \tag{4.143}$$

として導入した．そこで，全系の状態を，断熱近似により

$$|n(R)\rangle\Psi(R) \tag{4.144}$$

と直積の形とする．ここで，状態 $\Psi(R)$ は遅い系の状態である．速い系の状態 $|n(R)\rangle$ は，断熱定理により，固有値番号 n を変化させずに時間発展していく．そのとき，Berry の位相と通常の時間発展の位相が発生する．

遅い系は速い系に作用を及ぼしているから，その反作用があるはずである．この反作用がどのようなものであるかを見るために，$\Psi(R)$ を支配するハミルトニアン H_R を求めよう．

全系のハミルトニアン (4.142) を全系の状態 (4.144) に作用させると，

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{1}{2M}P^2 + H\right)|n(R)\rangle\Psi(R) \\
&= (H|n(R)\rangle)\Psi(R) + \frac{1}{2M}[(P^2|n(R)\rangle)\Psi(R) \\
&\quad +2(P|n(R)\rangle)(P\Psi(R)) + |n(R)\rangle(P^2\Psi(R))]
\end{aligned} \tag{4.145}$$

となる．次に，式 (4.145) の両辺に左から $\langle n(R)|$ を作用させる．つまり，速い変数に関する部分は期待値で置き換える．このとき，

$$P = -i\frac{\partial}{\partial R} = -i\nabla \tag{4.146}$$

として，

$$A(R) = i\langle n(R)|\nabla|n(R)\rangle \tag{4.147}$$

と定義する．この定義式は以前の (4.36) と同一のものである．このようにすると，$\Psi(R)$ に作用するハミルトニアン H_R は

$$H_R = \frac{1}{2M}(P - A(R))^2 + V(R) + E_n(R) \tag{4.148}$$

となる．$A(R)$ と $V(R)$ は量子数 n に依存するが，下添字 n を付けると，ベクトルの成分と紛らわしくなるので省略する．ここで，

$$\begin{aligned} V(R) &= \frac{1}{2M}(\langle n|\nabla n\rangle\langle n|\nabla n\rangle - \langle n|\nabla\nabla n\rangle) \\ &= \frac{1}{2M}\langle\nabla n|(1 - |n\rangle\langle n|)|\nabla n\rangle \end{aligned} \tag{4.149}$$

と定義した．ハミルトニアン (4.148) に対応するラグランジアンは

$$L_R = \frac{1}{2}M\dot{R}^2 + \dot{R}A - V(R) - E_n(R) \tag{4.150}$$

である．

結局，遅い系への速い系からの反作用として，ベクトル・ポテンシャル $A(R)$ とスカラー・ポテンシャル $V(R)$ が現れることがわかる．なお，ラグランジアン (4.150) に現れている $\dot{R}A$ の項は，場の理論の Wess-Zumino 項に対応するものである．この点に関しては，文献 [18] の第 7 章を参照するとよいだろう．

状態 $|n(R)\rangle$ の位相を

$$|n(R)\rangle \longrightarrow |n(R)\rangle' = e^{i\Lambda(R)}|n\rangle \tag{4.151}$$

と変化させると，(4.147) により

$$A(R) \longrightarrow A'(R) = A(R) - \nabla\Lambda(R) \tag{4.152}$$

とベクトル・ポテンシャルが変化する．スカラー・ポテンシャルは不変である．なお，Berry の位相は，$\nabla \times A(R)$ から計算されるものであり，この変換で不変である．一方，ベクトル・ポテンシャル $A(R)$ に対する変換 (4.152) は，ハミルトニアン H_R (4.148) の形からわかるように，

$$\Psi(R) \longrightarrow \Psi(R)' = e^{-i\Lambda(R)}\Psi(R) \tag{4.153}$$

と状態ベクトルの位相を変換することによって，打ち消すことができる．つまり，変換 (4.151)，(4.152)，(4.153) のもとで理論は不変となる．

例として，ハミルトニアン

$$H_T = \frac{1}{2M}\vec{P}^2 + \vec{\sigma}\cdot\vec{R} \tag{4.154}$$

を考えてみよう．この場合，速い系のハミルトニアン H は，4-4-1 項で調べた 2 準位系のもの (4.71) である：

$$H = \vec{\sigma}\cdot\vec{R}. \tag{4.155}$$

ハミルトニアン H の固有値 R に対応する固有ベクトルを上記の $|n\rangle$ とする (例えば，(4.79) の $|1\rangle$)．このとき，$\vec{R}$ の運動を支配する遅い系のハミルトニアンは，

$$H_R = \frac{1}{2M}(\vec{P} - \vec{A}(R))^2 + V(R) + R \tag{4.156}$$

である．ベクトル・ポテンシャル $\vec{A}(R)$ は，$\vec{R}$ 空間の原点に磁荷 ($-1/2$) の磁気単極子が存在する場合のものであり，例えば (4.90) となる．スカラー・ポテンシャル $V(R)$ は (4.149) から計算すると，

$$V(R) = \frac{1}{2M}\frac{1}{2R^2} \tag{4.157}$$

となる [13].

第 5 章

Hannay の角度

5-1 節　準備 (古典力学)

5-1-1　Lagrange 形式

考察の対象となる系の (一般化) 座標を $q_1, q_2, \cdots, q_N$ とする．この系の自由度 N は，この項と次の 2 つの項 (つまり，5-1-1，5-1-2，5-1-3 項) では，任意としておく．数式を簡略化するときには，これらの座標をまとめて q と書くことにする．これらの座標の時間微分 $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_N$ もまとめて $\dot{q}$ と書く．まず始めに，この系の座標 q，それらの時間微分 $\dot{q}$，および時刻 t に依存する関数 $L(q, \dot{q}, t)$ を導入する．この関数 $L(q, \dot{q}, t)$ は，一応は自由に選んでよいものとする．1 つ関数 L を決めると，これが 1 つの物理系に (現実的かどうかは別として) 対応すると見なす．この関数 L をラグランジアン (Lagrangian) と呼ぶ．

次に，これを時間で積分した作用 (action) と呼ばれる q の汎関数

$$S[q] = \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q}, t)\, dt \tag{5.1}$$

を定義する．この S の値は，時刻 t に依存する座標の関数形 $q(t)$ を決めると決まるものである．つまり S は関数 q の関数である．すなわち，S は q の汎関数である．

この作用 S が極値をとる場合が，つまり，そのような $q(t)$ が，この系の運動に対応する，というのが最小作用の原理である (この極値を考えるときには，時刻 t_0 と t_1 は問題に応じて固定しておく)．この原理は，座標 $q(t)$ の時間依存性を決定する運動方程式が

$$\delta S[q] = \delta \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q}, t)\, dt = 0 \tag{5.2}$$

であると要求する．上式の意味は，次のように座標を任意の量 $\delta q_k(t)$ だけ変化させたとき，

$$\begin{aligned} & q_k(t) \longrightarrow q'_k(t) = q_k(t) + \delta q_k(t), \\ & \text{ただし，} \delta q_k(t_0) = \delta q_k(t_1) = 0, \quad k = 1, 2, \cdots, N \end{aligned} \tag{5.3}$$

S の対応する変化量 δS がゼロということである．δS は具体的には，

$$\delta S[q] = \sum_k \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta \dot{q}_k \right) dt \tag{5.4}$$

となる．ここで，式 (5.3) を時間で微分すると，

$$\delta \dot{q}_k(t) = \delta \left(\frac{dq_k}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \delta q_k \tag{5.5}$$

が得られることに注意すると，

$$\delta S[q] = \sum_k \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \left(\frac{d}{dt} \delta q_k \right) \right) dt \tag{5.6}$$

である．第 2 項を部分積分すると，

$$\begin{aligned} \delta S[q] &= \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta q_k \bigg|_{t_0}^{t_1} + \sum_k \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \right) \delta q_k \, dt \\ &= \sum_k \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \right) \delta q_k \, dt \end{aligned} \tag{5.7}$$

が得られる.「現実」の $q_k(t)$ からのズレ $\delta q_k(t)$ は任意だから，$\delta S = 0$ という要請は

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) = 0, \quad k = 1, 2, \cdots, N \tag{5.8}$$

を導く．(5.8) は Euler 方程式，または，Lagrange 方程式と呼ばれている．

例 (調和振動子)

ラグランジアンとして

$$L = \frac{1}{2}\dot{q}^2 - \frac{1}{2}\omega^2 q^2 \tag{5.9}$$

を選ぶと，方程式 (5.8) は

$$\ddot{q} = -\omega^2 q \tag{5.10}$$

という調和振動子に対する Newton の運動方程式を再現する．

5-1-2 Hamilton 形式

(一般化) 運動量を次の式で定義する：

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}, \quad k = 1, 2, \cdots, N. \tag{5.11}$$

この p_k は，座標 q_k に対する (正準) 共役運動量とも呼ばれる．定義式 (5.11) は，p_k を $q, \dot{q}$ で表現する式であるが，この式から逆に，$\dot{q}_k$ が q, p で表現できる場合［つまり，(5.11) が $\dot{q}_k$ に対して解ける場合］には $\dot{q}_k = \dot{q}_k(q, p)$ であるから，

$$H(q, p, t) = \sum_{k=1}^{N} \dot{q}_k p_k - L(q, p, t) \tag{5.12}$$

という式で，ハミルトニアンを定義する．式 (5.11) から $\dot{q}_k$ が q, p で解けない場合は，Dirac の一般化力学の理論の対象となる．これに関しては，文献 [19] を見るとよい．ゲージ理論はこの Dirac の理論の守備範囲に入る．

Lagrange 形式は，力学を座標 q によって取り扱うのに対して，Hamilton 形式は座標 q と運動量 p によって考察する．

ハミルトニアン H を q と p で偏微分し，Lagrange 方程式 (5.8) を用いると，

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}, \quad k = 1, 2, \cdots, N \tag{5.13}$$

が導出できる．式 (5.13) は正準方程式と呼ばれ，これは q と p で表現した場合の運動方程式である．

正準変数 q と p を用いる場合，最小作用の原理は

$$\begin{aligned}\delta S &= \delta S[q, p, t] \\ &= \delta \int_{t_0}^{t_1} \left(\left(\sum_{k=1}^{N} p_k \dot{q}_k(q, p, t) \right) - H(q, p, t) \right) dt \\ &= 0\end{aligned} \tag{5.14}$$

の形となる．この式は，$\delta dq_k = d\delta q_k$ を用い，部分積分を行うと，

$$\begin{aligned}\delta S &= \delta \int \left(\sum p dq - H dt \right) \\ &= \sum \int \left(\delta p dq + p d(\delta q) - \frac{\partial H}{\partial p} \delta p dt - \frac{\partial H}{\partial q} \delta q dt \right) \\ &= \sum p \delta q \Big|_{t_0}^{t_1} + \sum \int \left(\delta p \left(dq - \frac{\partial H}{\partial p} dt \right) \right. \\ &\qquad \left. + \delta q \left(-dp - \frac{\partial H}{\partial q} dt \right) \right) \\ &= 0\end{aligned} \tag{5.15}$$

と変形できる (式を見やすくするために，上式では下添字 k を省略した．これからも，断りなしにこのような省略記法を用いることがあるが，誤解は生じないだろう)．δq_k と δp_k は互いに独立な任意の変化量なので，積分記号下のこれらの係数は各々ゼロでなければならない．このことからも，正準方程式 (5.13) が導出できる．

例　(調和振動子)

調和振動子の場合，運動量は (5.11) から

$$p = \dot{q} \tag{5.16}$$

となり，ハミルトニアンは (5.12) から

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{\omega^2}{2}q^2 \tag{5.17}$$

である．正準方程式 (5.13) は

$$\dot{q} = p, \quad \dot{p} = -\omega^2 q \tag{5.18}$$

となる．

5-1-3　正準変換

問題の系の変数を (q, p) から (Q, P) へ変換するとしよう：

$$Q_k = Q_k(q, p, t), \quad P_k = P_k(q, p, t). \tag{5.19}$$

(q, p) に対応するハミルトニアンを $h(q, p, t)$ と書き，(Q, P) に対応するハミルトニアンを $\widetilde{H}(Q, P, t)$ と書くことにする．正準方程式 (5.13) が $Q, P, \widetilde{H}$ に対しても成立するとする．このとき，運動方程式は

$$\begin{aligned} &\delta \int \left(\sum p\dot{q}(q, p, t) - h(q, p, t)\right) dt \\ &= \delta \int \left(\sum P\dot{Q}(Q, P, t) - \widetilde{H}(Q, P, t)\right) dt \\ &= 0 \end{aligned} \tag{5.20}$$

という条件から導かれる．2 行目の被積分量に変換式 (5.19) を代入すると 1 行目になり，それらはともに積分の後，変分をとるとゼロになるはずである．したがって，特に

$$\begin{aligned} \sum p\dot{q} - h(q, p, t) = &\sum P\dot{Q} - \widetilde{H}(Q, P, t) \\ &+ \frac{\partial}{\partial t}\left(K(q, P, t) - \sum QP\right) \end{aligned} \tag{5.21}$$

という式が成立しておれば (5.20) は満足される．式 (5.21) の右辺の末尾の時間微分の項は，(5.20) において積分が直ちにできて，積分領域の両端で $\delta q = \delta p = \delta Q = \delta P = 0$ の条件により，消える．なおこの形，$K - QP$ を選んだのは後の目的のためであり，他にも簡単な選択の余地はある．

等式 (5.21) を書き直すと，

$$\sum pdq - hdt = \sum PdQ - \widetilde{H}dt + \sum\left(\frac{\partial K}{\partial q}dq + \frac{\partial K}{\partial P}dP + \frac{\partial K}{\partial t}dt - QdP - PdQ\right) \tag{5.22}$$

となり，これから，dq_k, dP_k, dt の係数を比較して，

$$p_k = \frac{\partial K}{\partial q_k},$$
$$Q_k = \frac{\partial K}{\partial P_k}, \quad k = 1, 2, \cdots, N, \tag{5.23}$$

$$\widetilde{H}(Q, P, t) = h(q, p, t) + \frac{\partial K(q, P, t)}{\partial t} \equiv H(Q, P, t) + \frac{\partial K(q(Q, P, t), P, t)}{\partial t} \tag{5.24}$$

が結論できる．$H(Q, P, t)$ は $h(q, p, t)$ を新しい変数で表現し直したものである．このように，ある関数 $K(q, P, t)$ によって (5.23) の変数変換を行った場合には，ハミルトニアンを h から $\widetilde{H}$ へ変えることにより，問題の系に対する同値な記述ができることになる．このような変数変換を正準変換といい，K を正準変換の母関数と呼ぶ．

5-1-4　角変数と作用変数

a. 時間に陽に依存しないハミルトニアン

まず最初に，ハミルトニアン $h(q, p)$ が時間 t に陽に依存しない場合を調べる．ここでは話を簡単にするために，自由度が 1 の場合を考える．このとき，正準変換 $(q, p) \longrightarrow (\theta, I)$:

$$p = \frac{\partial K(q, I)}{\partial q}, \quad \theta = \frac{\partial K(q, I)}{\partial I} \tag{5.25}$$

によって，新しいハミルトニアン $\widetilde{H}(I)$ が新しい座標 θ に依存しないようにできたと仮定しよう．新しい正準方程式は

$$\dot{\theta} = \frac{\partial \widetilde{H}(I)}{\partial I} \equiv \omega, \quad \dot{I} = -\frac{\partial \widetilde{H}(I)}{\partial \theta} = 0 \tag{5.26}$$

である．これから，I は定数で，

$$\theta(t) = \omega t + \theta(t=0) \tag{5.27}$$

となる．系の運動は周期的であると仮定して，変数 θ は 1 周期につき 2π 増加するようにスケールを選ぶことにする：

$$\oint d\theta = 2\pi. \tag{5.28}$$

この積分は 1 周期についてのものを意味する．(5.25) により上式は次のように変形できる：

$$\begin{aligned}\oint d\theta &= \oint d\left(\frac{\partial K}{\partial I}\right) \\ &= \frac{\partial}{\partial I}\oint dK \\ &= \frac{\partial}{\partial I}\oint \frac{\partial K}{\partial q} dq \\ &= \frac{\partial}{\partial I}\oint p\, dq = 2\pi. \end{aligned} \tag{5.29}$$

これから，

$$I = \frac{1}{2\pi}\oint p\, dq \tag{5.30}$$

と定義してよいことがわかる．以上のような変数 θ を角変数，I を作用変数と呼ぶ．

実際に，変換の母関数 $K(q, I)$ を見つけるには次のようにする．まず，

$$\widetilde{H}(I) = h(q, p) = h\left(q, \frac{\partial K}{\partial q}\right) \tag{5.31}$$

という関係式に注目し，これを解いて $K(q, \widetilde{H})$ を決定する．次に，

$$p = \frac{\partial K}{\partial q} \tag{5.25}$$

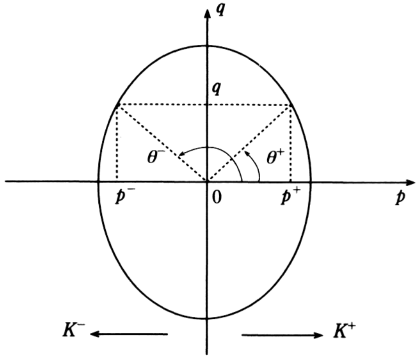


図 5-1　調和振動子の軌道は p-q 平面上の楕円である．p, θ 等は q の 2 価関数となる．

を (5.30) に代入して，I を計算する．この I は $\widetilde{H}$ の関数となるので，これから逆に $\widetilde{H}$ を I で表現する．したがって，$K(q, \widetilde{H})$ は $K(q, I)$ と表現し直せる．これから

$$\theta = \frac{\partial K}{\partial I} \tag{5.25}$$

により θ が決定できる．関係式 (5.31) は Hamilton-Jacobi 方程式と呼ばれている．

例　(調和振動子)

具体的に調和振動子の場合には次のようになる．まず，変数 (q, p) から (θ, I) への正準変換の母関数 $K(q, I)$ を求める：

$$\begin{aligned} &K^{\pm}(q, I) \\ &\quad = I\left(\arcsin_{\pm}\left(\sqrt{\frac{\omega}{2I}}q\right) \pm \left(\sqrt{\frac{\omega}{2I}}q\right)\left(1 - \left(\sqrt{\frac{\omega}{2I}}q\right)^2\right)^{1/2}\right). \end{aligned} \tag{5.32}$$

$K^{\pm}$ の上添字 $\pm$，および $\arcsin_{\pm}$ の下添字 $\pm$ は図 5-1 の右方，左方の分枝を表す．

式 (5.32) から実際に計算すると,

$$\frac{\partial K^{\pm}}{\partial q} = \pm 2I\sqrt{\frac{\omega}{2I}}\sqrt{1-\frac{\omega}{2I}q^2} \equiv p^{\pm} \tag{5.33}$$

となる．p の上添字 $\pm$ は q に対する p の 2 価性に対応している．次に角変数 θ は次のようになる：

$$\frac{\partial K^{\pm}}{\partial I} = \arcsin_{\pm}\left(\sqrt{\frac{\omega}{2I}}q\right) \equiv \theta^{\pm}. \tag{5.34}$$

一般に周期運動の場合，1 つの q の値に対して p は唯 1 つ決まるとは限らない．p は q の関数としては多価となる．したがって，正準変換の母関数 K も q の関数としては，2 個以上の分枝を持つことになる．そして，K の多価性は角変数 θ にも及ぶ．

他方，角変数 θ を基準にして他の量を表すと,

$$q = \sqrt{\frac{2I}{\omega}}\sin\theta, \quad p = \sqrt{2I\omega}\cos\theta \tag{5.35}$$

となり，当然ながら多価性はこの場合は消える．また

$$K(q, I) = I(\theta + \sin\theta\cos\theta) \tag{5.36}$$

であり，新しいハミルトニアンは,

$$\widetilde{H}(I) = h(q(\theta, I), p(\theta, I)) = I\omega \tag{5.37}$$

である．作用変数 I は量子論では

$$I \longrightarrow \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar \tag{5.38}$$

と置き変わるものである．

b. 時間に陽に依存するハミルトニアン

次に，ハミルトニアンが時間に依存する場合を調べる．ここでは，ある時間依存のパラメタ $\vec{R}(t)$ を含むハミルトニアン $h(q,p,\vec{R}(t))$ を考える．

まず，パラメタ $\vec{R}(t)$ を一時的に一定と見なして，**a.** の方法で，角変数 θ と，作用変数 I へ変数変換する：

$$q = q(\theta, I, \vec{R}(t)), \quad p = p(\theta, I, \vec{R}(t)). \tag{5.39}$$

その変換の母関数を $K^{\lambda}(q, I, \vec{R}(t))$ とする．母関数等は座標 q について一般に多価であるので，その分枝を λ で区別する．以下の式で λ が現れる箇所では状況に応じた分枝が選ばれるものとする．この λ は，θ と I を指定すれば決まる．変換式は，

$$p^{\lambda} = \frac{\partial K^{\lambda}(q, I, \vec{R}(t))}{\partial q}, \quad \theta^{\lambda} = \frac{\partial K^{\lambda}(q, I, \vec{R}(t))}{\partial I} \tag{5.40}$$

である．また，この場合の Hamilton-Jacobi 方程式は

$$H(I, \vec{R}(t)) = h\left(q, \frac{\partial K}{\partial q}, \vec{R}(t)\right) \tag{5.41}$$

である．もとのハミルトニアン $h(q,p,\vec{R}(t))$ に (5.39) を代入して，この古い h を新しい変数 θ, I で表現したものを H と記すことにした：

$$H(I, \vec{R}(t)) = h(q(\theta, I, \vec{R}(t)), p(\theta, I, \vec{R}(t)), \vec{R}(t)). \tag{5.42}$$

角変数 θ と作用変数 I は，この新しい H が角変数 θ に依存しないように選んでいるのである．

一方，新しい変数 θ, I の運動を決定するハミルトニアンは，(5.24) により

$$\begin{aligned}\widetilde{H}(\theta, I, t) &= H(I, \vec{R}(t)) + \frac{\partial}{\partial t} K^{\lambda}(q, I, \vec{R}(t)) \\ &= H(I, \vec{R}(t)) + \frac{d\vec{R}(t)}{dt} \frac{\partial}{\partial \vec{R}} K^{\lambda}(q, I, \vec{R}(t))\end{aligned} \tag{5.43}$$

である．

I と θ で表すと K^{λ} の多価性は消えるので，これを K と書くことにする：

$$K(\theta, I, \vec{R}(t)) = K^{\lambda}(q(\theta, I, \vec{R}(t)), I, \vec{R}(t)). \tag{5.44}$$

式 (5.44) は $0 \leqq \theta < 2\pi$ で定義されている．θ を 0 から 2π へ変化させたときの K の変化量を計算しよう．

$$\begin{aligned}
&K(2\pi, I, \vec{R}(t)) - K(0, I, \vec{R}(t)) \\
&\quad = \int_0^{2\pi} \frac{\partial K(\theta, I, \vec{R}(t))}{\partial \theta} d\theta \\
&\quad = \int_0^{2\pi} \frac{\partial q(\theta, I, \vec{R}(t))}{\partial \theta} \frac{\partial K^{\lambda}(q, I, \vec{R}(t))}{\partial q} d\theta \\
&\quad = \int_0^{2\pi} \frac{\partial q(\theta, I, \vec{R}(t))}{\partial \theta} p^{\lambda}(q, I, \vec{R}(t))\, d\theta \\
&\quad = \int_0^{2\pi} \frac{\partial q(\theta, I, \vec{R}(t))}{\partial \theta} p(\theta, I, \vec{R}(t))\, d\theta \\
&\quad = \oint p\, dq = 2\pi I
\end{aligned} \tag{5.45}$$

となる．この計算過程では，$\vec{R}(t), I$ を固定しているので，p と q は θ の周期関数であり，したがって最後の行の閉回路積分への変換が可能となる．

新しいハミルトニアンの表現 (5.43) の第 2 項を調べるために，(5.44) を $\vec{R}$ によって偏微分しよう：

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial K(\theta, I, \vec{R})}{\partial \vec{R}} \\
&\quad = \frac{\partial K^{\lambda}(q, I, \vec{R})}{\partial \vec{R}} + \frac{\partial q(\theta, I, \vec{R})}{\partial \vec{R}} \frac{\partial K^{\lambda}(q, I, \vec{R})}{\partial q} \\
&\quad = \frac{\partial K^{\lambda}(q, I, \vec{R})}{\partial \vec{R}} + \frac{\partial q(\theta, I, \vec{R})}{\partial \vec{R}} p(\theta, I, \vec{R})
\end{aligned} \tag{5.46}$$

となる．さて (5.43) では (5.46) の右辺第 1 項が問題である．これを (5.43) に代入すると，次の表現を得る：

$$\widetilde{H}(\theta, I, t) = H(I, \vec{R}) + \frac{d\vec{R}}{dt}\left(\frac{\partial K(\theta, I, \vec{R})}{\partial \vec{R}} - \frac{\partial q(\theta, I, \vec{R})}{\partial \vec{R}} p(\theta, I, \vec{R})\right). \tag{5.47}$$

$\widetilde{H}$ の表式 (5.47) の θ 依存性を見よう．p と q を通じて θ が現れるところは，θ に関して 2π 周期となる．K 自身は θ に関して周期的ではないが，(5.45) により $\partial K/\partial \vec{R}$ は周期的となる．したがって，(5.47) の $\widetilde{H}$ は θ の周期関数であると結論できる．

例　(調和振動子)

角振動数 ω が時間に依存する場合を考える．このとき，以前の式 (5.32)～(5.36) は，そのまま ω を $\omega(t)$ と置き換えれば成立する．ハミルトニアンは

$$\widetilde{H}(\theta, I, t) = H(I, \omega(t)) + \frac{\partial K^{\lambda}}{\partial t} \tag{5.48}$$

となる．ここで，$H(I, \omega(t))$ はもとのハミルトニアン $h(q, p, \omega(t))$ を新しい変数 θ, I で表現し直したものであり，今の場合

$$H(I, \omega(t)) = I\omega(t) \tag{5.49}$$

である．この続きの計算は，次節の例のところで実行する．

5-1-5　断熱不変量

前節に引き続き，ここでも自由度が 1 の周期運動系を考える．そして，時間的にゆっくり (断熱的に) 変化するパラメタ $\vec{R}(t)$ がハミルトニアンに入っている場合を調べる．系のエネルギー E は

$$E = h(q, p, \vec{R}(t)) \tag{5.50}$$

であり，時間的に変化する．その変化率は

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dt} = \frac{dh}{dt} &= \frac{\partial h}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial h}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial h}{\partial \vec{R}}\dot{\vec{R}} \\ &= (-\dot{p})\dot{q} + \dot{q}\dot{p} + \frac{\partial h}{\partial \vec{R}}\dot{\vec{R}} \\ &= \frac{\partial h}{\partial \vec{R}}\dot{\vec{R}}\end{aligned} \tag{5.51}$$

である (2 行目に移るときに Hamilton の運動方程式を用いた).

この式から，エネルギーの平均的変化率を計算しよう．パラメタ $\vec{R}(t)$ は t とともにゆっくり変化するので，1 周期 τ の間に $\vec{R}(t)$ はほとんど変化せず，$\partial h/\partial\vec{R}$ を 1 周期について考えるときには，$\vec{R}(t)$ は一定と見なしてよいとする．また，$\dot{\vec{R}}$ もこの 1 周期の間，一定と見なす．式 (5.51) の最後の行を 1 周期 τ について平均すると，

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\mathrm{AV}} = \dot{\vec{R}}\frac{1}{\tau}\int_0^{\tau}\frac{\partial h}{\partial\vec{R}}dt \tag{5.52}$$

となる．ここで積分変数を t から q へ変換すると，

$$\begin{aligned}\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\mathrm{AV}} &= \dot{\vec{R}}\frac{1}{\tau}\oint\frac{\partial h}{\partial\vec{R}}\frac{dt}{dq}dq \\ &= \dot{\vec{R}}\frac{1}{\tau}\oint\left(\left(\frac{\partial h}{\partial\vec{R}}\right)\Big/\left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)\right)dq\end{aligned} \tag{5.53}$$

である．2 行目へ移るときに，運動方程式

$$\dot{q} = \frac{dq}{dt} = \frac{\partial h}{\partial p} \tag{5.54}$$

を用いた．この q についての積分のもとでは，$\vec{R}(t)$ は一定と見なしているわけで，式 (5.50) によりエネルギー $E = h$ も一定として取り扱わねばならない．つまり，積分は R 一定で，エネルギー E も一定の運動に対する 1 周期を考えている．

さて，この被積分関数に $\partial h/\partial\vec{R}$ と $\partial h/\partial p$ が現れているが，これらはエネルギー E が一定という条件により関係しているはずである．積分は座標 q について行われる．運動量 p はというと，式 (5.50) を解いて

$$p = p(E, q, \vec{R}(t)) \tag{5.55}$$

という依存性を持つことがわかる．この p を再び (5.50) へ代入すると，式 (5.50) は当然 $E = E$ という恒等式である．したがって，p に式 (5.55) を用いて恒等式となる式 (5.50) を $\vec{R}$ で偏微分すると結果はもちろんゼロである：

$$\frac{\partial h}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial \vec{R}} + \frac{\partial h}{\partial \vec{R}} = 0. \tag{5.56}$$

同様に，恒等式としての式 (5.50) を E で偏微分すると，今度は結果は 1 である：

$$\frac{\partial h}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial E} = 1. \tag{5.57}$$

式 (5.56) を用いると，式 (5.53) は

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\mathrm{AV}} = \dot{\vec{R}}\frac{1}{\tau}\oint\left(-\frac{\partial p}{\partial \vec{R}}\right)dq \tag{5.58}$$

となる．(5.52) から (5.53) への積分変数変換と同じく，運動方程式 (5.54) を用いて t から q へ

$$dt = \frac{dq}{(\partial h/\partial p)}$$

によって書き換えると，周期 τ に対して

$$\tau = \int_0^\tau dt = \oint\frac{dq}{(\partial h/\partial p)} \tag{5.59}$$

という表式が得られる．この式に (5.57) を用いると，

$$\tau = \oint\frac{\partial p}{\partial E}dq \tag{5.60}$$

となる．式 (5.60) を (5.58) へ代入してまとめると，

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\mathrm{AV}}\oint\frac{\partial p}{\partial E}dq + \dot{\vec{R}}\oint\frac{\partial p}{\partial \vec{R}}dq = 0 \tag{5.61}$$

となる．ここで，$(dE/dt)_{\mathrm{AV}}$ と $\dot{\vec{R}}$ は積分のもとでは一定と見なせるものなので，

$$\oint\left(\frac{\partial p}{\partial E}\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\mathrm{AV}} + \frac{\partial p}{\partial \vec{R}}\frac{d\vec{R}}{dt}\right)dq = 0 \tag{5.62}$$

と書ける．(5.62) の積分記号下で，

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{\mathrm{AV}} = \frac{dE}{dt} \tag{5.63}$$

と仮定すると (これも断熱過程という前提条件の中にはいるだろう)，

$$\oint \left(\frac{\partial p}{\partial E} \frac{dE}{dt} + \frac{\partial p}{\partial \vec{R}} \frac{d\vec{R}}{dt} \right) dq = 0 \tag{5.64}$$

である．式 (5.55) を考慮すると，(5.64) から

$$\frac{d}{dt} \oint p\, dq = 0,$$

つまり，

$$\frac{d}{dt} I = 0 \tag{5.65}$$

が結論できる．結局，パラメタ $\vec{R}(t)$ を一定と見なして計算した作用変数は近似的に不変，つまり，作用変数は断熱不変量である，ということができる．

この節の方法［平均量というものを，パラメタを一時的に固定して，一周期についての平均として求める方法］は，後にも利用する．このアプローチは，Landau-Lifshits の教科書「理論物理学教程・力学」で説明されている [20]．数学的に厳密な詳しい取扱いは，例えば，Arnold の教科書「古典力学の数学的方法」に出ている [21]．

例　(調和振動子で角振動数 ω が時間に依存する場合)

今の場合，$R(t)$ を $\omega(t)$ とする．ハミルトニアンは (5.48) である．式 (5.32) の K^{λ} を用いて，$\partial K^{\lambda}/\partial t$ を計算すると，次のようになる：

$$\frac{\partial K^{\pm}}{\partial t} = \frac{\partial \sqrt{\omega}}{\partial t} \frac{\partial K^{\pm}}{\partial \sqrt{\omega}} = \frac{I\dot{\omega}}{2\omega} \sin(2\theta). \tag{5.66}$$

作用変数 I の時間依存性を具体的に運動方程式によって計算すると次のようになる：

$$\dot{I} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \theta} = -\frac{I\dot{\omega}}{\omega}\cos(2\theta). \tag{5.67}$$

角速度の時間変化は極めてゆっくりであるとして，

$$\frac{\dot{\omega}}{\omega} \equiv \varepsilon(t) \approx 0 \tag{5.68}$$

と仮定する．I に対する微分方程式 (5.67) は容易に解ける：

$$I(t) = I(t=0)\exp\left(-\int_0^t \varepsilon(t)\cos(2\theta(t))\,dt\right). \tag{5.69}$$

角変数の時間変化の方は

$$\dot{\theta}(t) = \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial I} = \omega(t) + \frac{\dot{\omega}}{2\omega}\sin(2\theta) \tag{5.70}$$

となり，時間 τ の間の角度の全変化は

$$\int_0^\tau \dot{\theta}\,dt = \int_0^\tau \omega\,dt + \int_0^\tau \frac{\dot{\omega}}{2\omega}\sin(2\theta)\,dt \tag{5.71}$$

である．第 1 項は断熱パラメタが一定としたときの (第 2 項 $\dot{\omega}$ のがゼロのときの) 角速度からの寄与である．断熱過程の仮定のもとでは，(5.68) の ε は (5.71) の第 2 の積分の中では定数と見なせるものであり，θ が 2π 変化するときには，第 2 項の寄与は消える．同様に，(5.69) の指数部分の積分も消え，この断熱性の仮定の場合には，$I(\tau) = I(0)$ となる．

なお，θ に関して 1 周期の間の平均操作 (AV という下添字を付ける操作) をしても (5.71) の第 2 項は消える．1 周期についての平均をとっても，この第 2 項が消えずに残る場合がある．これが量子論での Berry の位相に対応するものであることは，後に論ずる．

5-2 節　準備 (量子論の半古典極限)

この節も前の 2 つの項に引き続き，話を簡単にするため，最初は自由度が 1 の系を考える．Hannay の角を論ずるときには，一般的に自由度 N とする

が，そこでは，各自由度につき個別に，1 自由度系の取り扱いが適用可能な場合のみを考察する．

さて，Schrödinger の波動関数の半古典的な極限を考えよう．半古典極限というのは，Planck 定数 $\hbar$ をゼロに近づけた極限のことだが，完全に古典論になってしまわないような領域も含んでいる．

ハミルトニアン $h(q, p, \vec{R}(t))$ の固有関数 $\psi(q, n, \vec{R}(t))$ を

$$\psi(q, n, \vec{R}) = \sqrt{\rho(q, n, \vec{R})} \exp\left(\frac{i}{\hbar} K(q, n, \vec{R})\right) \tag{5.72}$$

と書くことにしよう．時間依存性は，パラメタ $\vec{R}$ を通じて現れる．ρ は確率解釈の基本原理から明らかに粒子密度であり，これは古典的に意味のハッキリしたものである．問題は，位相部分である．

(5.72) を Schrödinger 固有値方程式

$$h(q, p, \vec{R}(t))\psi(q, n, \vec{R}) = E(n, \vec{R})\psi(q, n, \vec{R}) \tag{5.73}$$

へ代入して変形すると，

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} K\right) h\sqrt{\rho} \exp\left(\frac{i}{\hbar} K\right) = E\sqrt{\rho} \tag{5.74}$$

となる．

さて，

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$$

だから，

$$p \exp\left(\frac{i}{\hbar} K\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} K\right) \frac{\partial K}{\partial q} + \exp\left(\frac{i}{\hbar} K\right) p,$$

つまり，

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} K\right) p \exp\left(\frac{i}{\hbar} K\right) = \frac{\partial K}{\partial q} + p \tag{5.75}$$

である．したがって，(5.74) の左辺において，p を (5.75) の右辺の量で置き換えて，

$$h\left(q, \frac{\partial K}{\partial q} + p, \vec{R}(t)\right)\sqrt{\rho} = E(n, \vec{R}(t))\sqrt{\rho} \tag{5.76}$$

となる．この式で Planck 定数 $\hbar$ をゼロとおくと，

$$h\left(q, \frac{\partial K}{\partial q}, \vec{R}(t)\right) = E(n, \vec{R}(t)) \tag{5.77}$$

が得られる．

Hamilton-Jacobi の方程式 (5.41) において，$H(I, \vec{R}(t))$ を $E(n, \vec{R}(t))$ と見なせば，(5.77) は Hamilton-Jacobi 方程式そのものである．$H(I, \vec{R}(t))$ は $\vec{R}(t)$ を定数とした場合の系のエネルギーであるから，$E(n, \vec{R}(t))$ と同一の意味を持っている．したがって $K(q, n, \vec{R}(t))$ は (5.40) で導入した $K(q, I, \vec{R}(t))$ と正に同一のものである．ただし，ここで

$$I = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar \tag{5.78}$$

と読み替えることにする．なお，上式の 1/2 の因子は場合によっては別の値になることもあるが，今後は I が基本的には $n\hbar$ であるということのみを利用するので，とりあえず (5.78) としておく．

* * * * * * *

波動関数の位相が正準変換の母関数 $K(q, I, \vec{R}(t))$ であることは，別の議論からも導ける．de Bloglie の物質波の考えによると，波動場の位相 $\Phi(q)$ は，基本的には波数ベクトル $\vec{k}$ と座標 $\vec{q}$ の内積である．具体的には，

$$\vec{\nabla}\Phi = \vec{k} = \frac{1}{\hbar}\vec{p} \tag{5.79}$$

である．$\vec{\nabla}$ は座標 q についての微分である．したがって，

$$\Phi(q) = \frac{1}{\hbar}\int_{q_0}^{q} p(q')\,dq' \tag{5.80}$$

と表現できる (自由度を 1 として表記を簡単にした)．ところで,

$$p = \frac{\partial K(q, I, \vec{R}(t))}{\partial q} \tag{5.81}$$

であるから［例えば，(5.40)］,

$$\begin{aligned} \Phi(q) &= \frac{1}{\hbar} \int_{q_0}^{q} \frac{\partial K(q', I, \vec{R}(t))}{\partial q'} dq' \\ &= \frac{1}{\hbar} K(q, I, \vec{R}(t)) + \text{constant} \end{aligned} \tag{5.82}$$

と結論できる．なお，この位相部分を角変数 θ で表現した場合を考えておこう．(5.45) で調べたように，$\theta \longrightarrow \theta + 2\pi$ で $K \longrightarrow K + 2\pi I$ と変化する．したがって，波動関数の θ についての一価性を要求すると，$I = n\hbar$ でなければならないことになる．ただし，密度の方から (-1) の因子が生ずることもあるので，$I = (n + 1/2)\,\hbar$ も可能だが，半古典極限は，n が大きい領域だから，これより深い議論には立ち入らないことにする．

* * * * * * *

次に，密度 ρ を考察しよう．力学変数を角変数 θ，作用変数 I へ変換して考えると，$\vec{R}(t)$ を固定したときには I は定数で，一方 $\theta(t)$ は $\omega t + \text{constant}$ という振る舞いをする．したがって，θ 空間では状態密度は一定である．この一定の状態密度の θ 空間から，もとの q 空間へ戻ってくると，そこでの状態密度 $\rho(q)$ は明らかに,

$$\rho(q) \propto \left| \frac{d\theta}{dq} \right| \tag{5.83}$$

となる．調和振動子の場合の様子を図 5-2 に示す．

式 (5.83) はさらに,

$$\theta = \frac{\partial K(q, I, \vec{R}(t))}{\partial I}$$

を利用して［例えば，(5.40)］,

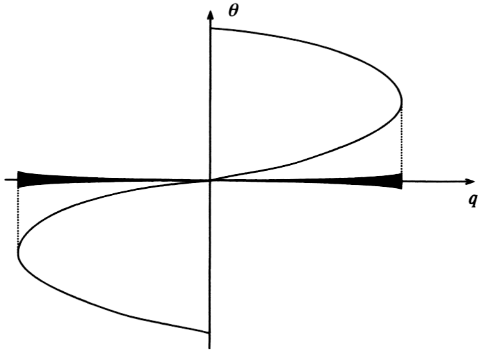


図 5-2　θ 空間では状態密度は一定である．したがって，q 空間では状態密度は (5.83) になる．

$$\rho(q) = c^2 \left| \frac{\partial^2 K(q, I, \vec{R}(t))}{\partial q \partial I} \right| \tag{5.84}$$

と表される (c は定数である)．

調和振動子の例 (図 5-2) からも明らかなように，(5.83)，(5.84) では θ, K の多価性による分枝について和をとる必要がある．また，位相の方の分枝も密度の分枝に対応したものを選ぶ必要がある．

結局，波動関数の半古典極限として

$$\psi(q, n, \vec{R}) = c \sum_{\lambda} \left| \frac{\partial^2 K^{\lambda}(q, I, \vec{R}(t))}{\partial q \partial I} \right|^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} K^{\lambda}(q, I, \vec{R}(t)) \right) \tag{5.85}$$

を得る．上式において右辺の I は，(5.78) によって n に読み替える．

自由度が N のときには，以上の考えをそのまま拡張すれば，

$$\psi(q, n, \vec{R}) = c \sum_{\lambda} \left| \det \frac{\partial^2 K^{\lambda}(q, I, \vec{R}(t))}{\partial q_i \partial I_k} \right|^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} K^{\lambda}(q, I, \vec{R}(t)) \right) \tag{5.86}$$

が結論できる．ここで，q は $q_1, q_2, \cdots, q_N; I$ は $I_1, I_2, \cdots, I_N$ をまとめて表している．n も同様に $n_1, n_2, \cdots, n_N$ をまとめて表している．そして，I_i は対応する n_i に読み替える．(5.86) 左辺の密度の項は，K を，q_i, I_k $(i, k = 1, 2, \cdots, N)$ で微分して得られる行列の行列式の絶対値の平方根である．

この式 (5.86) はさらに

$$\psi(q, n, \vec{R}) = c \sum_{\lambda} \left| \det \frac{\partial \theta_k^\lambda(q, I, \vec{R}(t))}{\partial q_i} \right|^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} K^\lambda(q, I, \vec{R}(t)) \right) \tag{5.87}$$

とも書き表せる．表式 (5.86)，(5.87) についての文献は例えば [22] である．

波動関数 $\psi(q, n, \vec{R})$ を規格化しよう．(5.87) を用いると，

$$\begin{aligned} 1 &= \int dq_1 \int dq_2 \cdots \int dq_N \, \psi^\dagger(q, n, \vec{R}) \psi(q, n, \vec{R}) \\ &= c^2 \int dq_1 \int dq_2 \cdots \int dq_N \sum_\lambda \left| \det \frac{\partial \theta_k^\lambda}{\partial q_i} \right| \\ &= c^2 \oint d\theta_1 \oint d\theta_2 \cdots \oint d\theta_N \\ &= (2\pi)^N c^2 \end{aligned} \tag{5.88}$$

と計算できる．2 行目から 3 行目に移るときに，

$$\sum_\lambda \left| \det \frac{\partial \theta_k^\lambda}{\partial q_i} \right|$$

が座標変換のヤコビアン (Jacobian) であることを用いた．(5.88) から，

$$c = (2\pi)^{-N/2} \tag{5.89}$$

と求まる．

最後に，時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = H(q, p, t) \psi(q, t) \tag{5.90}$$

の解 $\psi(q,t)$ の半古典極限を見ておこう．ここでは，正準変換を使わないので，小文字と大文字の変数に対応するハミルトニアンの区別 h と H を導入しない．なお，以下の議論は任意の自由度 N へ直ちに拡張できる．

まず，

$$\psi(q,t) = \sqrt{\rho(q,t)}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S(q.t)\right) \tag{5.91}$$

とおく．これを (5.90) へ代入して変形すると，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sqrt{\rho} - \sqrt{\rho}\frac{\partial S}{\partial t} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)H\sqrt{\rho}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) \tag{5.92}$$

という式が得られる．関係式 (5.75) を利用すると

$$i\hbar\frac{\partial\sqrt{\rho}}{\partial t}(\sqrt{\rho})^{-1} = \frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q} + p, t\right) \tag{5.93}$$

となる．ここで，Planck 定数 $\hbar$ をゼロとおくと，

$$H\left(q, \frac{\partial S(q,t)}{\partial q}, t\right) + \frac{\partial S(q,t)}{\partial t} = 0 \tag{5.94}$$

が得られる．式 (5.94) も Hamilton-Jacobi 方程式と呼ばれている．ハミルトニアン H が時間に陽に依存しないときには，

$$S(q,t) = -Et + K(q) \tag{5.95}$$

とおくと，(5.94) は

$$H\left(q, \frac{\partial K(q)}{\partial q}\right) = E \tag{5.96}$$

となり，これは以前にでてきた Hamilton-Jacobi 方程式 (5.31) である．

さて，積分

$$S(q,t) = \int_{t_0}^{t} L(q,\dot{q},t')\,dt' \tag{5.97}$$

が Hamilton-Jacobi 方程式 (5.94) の解となっていることを見ておこう．今の場合，この積分 S を t と $q(t)$ の関数と見なすことにする．

まず，S を t で微分すると，

$$\frac{dS}{dt} = L(q, \dot{q}, t) \tag{5.98}$$

となる．次に，$q(t)$ の変分：

$$q(t) \longrightarrow q'(t) = q(t) + \delta q(t), \quad \text{ただし}, \ \delta q(t_0) = 0 \tag{5.99}$$

に対応する S の変分を考えると，5-1 節と同様にして，

$$\delta S = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q(t) + \int_{t_0}^{t} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right) \delta q dt \tag{5.100}$$

となる．運動方程式 (5.8) により上式第 2 項は消える．そして，

$$\frac{\partial S(q(t), t)}{\partial q(t)} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}(t)} \equiv p(t) \tag{5.101}$$

が求まる．

さて，(5.98) から

$$\begin{aligned} L(q, \dot{q}, t) &= \frac{dS(q, t)}{dt} \\ &= \frac{\partial S(q, t)}{\partial t} + \frac{\partial S(q, t)}{\partial q} \frac{dq}{dt} \end{aligned} \tag{5.102}$$

となる．(5.101) を用いると，

$$L(q, \dot{q}, t) = \frac{\partial S(q, t)}{\partial t} + p(q, \dot{q}, t) \dot{q} \tag{5.103}$$

が得られ，ついで

$$\dot{q}p - L + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

から，ハミルトニアン $H(q, p, t)$ の定義と (5.101) を用いて，

$$H\left(q, \frac{\partial S(q, t)}{\partial q}, t\right) + \frac{\partial S(q, t)}{\partial t} = 0$$

が結論できる．この式は，(5.94) そのものであり，結局，積分 (5.97) は Hamilton-Jacobi 方程式 (5.94) を満たすことがわかる．

5-3 節　Hannay の角度

5-3-1　古典的断熱角 (Hannay の角度)

Berry の位相を考察した場合と同様の状況を，今度は古典論で調べよう．この目的のために，時間とともにゆっくり変化するパラメタ $\vec{R}(t)$ を含む N 自由度のハミルトニアン $h(q,p,\vec{R})$ から出発する．自由度を区別する q_k 等の下添字 k は，式が煩雑になる場合があるので，誤解が生じそうにないところでは，省略する．パラメタ $\vec{R}(t)$ は長い時間 T の間に，パラメタ空間中で閉じたループ C を描いて元の値へ戻るとする．

変数を，(q,p) から角変数・作用変数の組 (θ,I) へ変換する．この変換式，変換の母関数 $K^\lambda(q,I,\vec{R})$ ，新しいハミルトニアン $\widetilde{H}(\theta,I,\vec{R})$ はそれぞれ，すでに，(5.40)，(5.44)，(5.47) で調べたものである［以前は，自由度を 1 として考えていたが，そこでの取扱い方法が直ちに自由度 N へ拡張できるような場合をここでは仮定している］．

ここでは，断熱過程を考えているので，作用変数 I は「不変」と見なしてよい．したがって，短い時間スケールでは，運動はある「不変」の I に応じた角変数 θ 空間中の「周期」的運動であると思い描くことができる．ただし，I も θ も N 個ある．つまり，$I=(I_1,I_2,\cdots,I_N), \theta=(\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_N)$．

そこで，角変数 θ_k の時間変化の様子を調べることにしよう．正準方程式 (5.13) を新しい変数に対して適用すると，

$$\frac{d\theta_k}{dt}=\frac{\partial\widetilde{H}(\theta,I,t)}{\partial I_k} \tag{5.104}$$

である．ハミルトニアン $\widetilde{H}$ の表式 (5.47) を用いると，

$$\begin{aligned}\frac{d\theta_k}{dt}=&\frac{\partial H(I,\vec{R})}{\partial I_k}\\&+\frac{\partial}{\partial I_k}\frac{d\vec{R}}{dt}\left(\frac{\partial K(\theta,I,\vec{R})}{\partial\vec{R}}-\sum_{l=1}^{N}p_l(\theta,I,\vec{R})\frac{\partial q_l(\theta,I,\vec{R})}{\partial\vec{R}}\right)\end{aligned} \tag{5.105}$$

となる．ここで，右辺最後の項に自由度 l についての和が現れたのは，(5.46), (5.47) のこの部分の $\vec{R}$ 微分が微分のチェイン・ルールから生じているからである．式 (5.105) の第 1 項は，明らかに $\vec{R}$ を一定とした場合の角速度である：

$$\omega_k(I,\vec{R}) \equiv \frac{\partial H(I,\vec{R})}{\partial I_k}. \tag{5.106}$$

第 2 項が問題の項である．これが長時間 T の間に，θ にどのような正味の変化量 $\Delta\theta_k$ を与えるかを調べたい：

$$\Delta\theta_k(I,C) = \int_0^T dt \frac{\partial}{\partial I_k}\frac{d\vec{R}}{dt}\left(\frac{\partial K(\theta,I,\vec{R})}{\partial\vec{R}} - \sum_{l=1}^{N} p_l(\theta,I,\vec{R})\frac{\partial q_l(\theta,I,\vec{R})}{\partial\vec{R}}\right). \tag{5.107}$$

ここでは，作用変数 I とパラメタ空間のループ C に対する $\Delta\theta$ の依存性を明示した．表式 (5.107) を次のように書き換える：

$$\begin{aligned}\Delta\theta_k(I,C) &= \frac{\partial}{\partial I_k}\int_0^T dt\frac{d\vec{R}}{dt}\left(\frac{\partial K}{\partial\vec{R}} - \sum_{l=1}^{N} p_l\frac{\partial q_l}{\partial\vec{R}}\right)\\ &= \frac{\partial}{\partial I_k}\oint_C d\vec{R}\left(\frac{\partial K}{\partial\vec{R}} - \sum_{l=1}^{N} p_l\frac{\partial q_l}{\partial\vec{R}}\right)\\ &= \frac{\partial}{\partial I_k}\oint_C d\vec{R}\left(\vec{\nabla}K - \sum_{l=1}^{N} p_l\vec{\nabla}q_l\right).\end{aligned} \tag{5.108}$$

最後の行の $\vec{\nabla}$ は単に，その上の行の $(\partial/\partial\vec{R})$ の書き換えである．

この式 (5.108) の最後の行の第 1 項は，勾配の閉路積分だからゼロとなる (もちろん，K は $\vec{R}$ の 1 価関数である)．したがって，

$$\Delta\theta_k(I,C) = -\frac{\partial}{\partial I_k}\oint_C\left(\sum_{l=1}^{N} p_l\vec{\nabla}q_l\right)d\vec{R} \tag{5.109}$$

となる．(5.109) における積分は，長時間 T にわたるものである．一方，その被積分量は一般に T に比べると圧倒的に短い時間スケールで「周期」的運動を行っている．その一周期の間，$\vec{R}$ は事実上一定と見なしてよい．

したがって，ここで 5-1-5 項で用いた平均化の方法を適用する．すなわち，

$$\Delta\theta_k(I,C) = -\frac{\partial}{\partial I_k}\oint_C \left(\sum_{l=1}^{N} p_l \vec{\nabla} q_l\right)_{\mathrm{AV}} d\vec{R} \tag{5.110}$$

と置き換える．ここで，AV の意味は θ についての一周期の平均値：

$$\left(\sum_{l=1}^{N} p_l \vec{\nabla} q_l\right)_{\mathrm{AV}} = \frac{1}{(2\pi)^{2N}}\oint d\theta_1 \oint d\theta_2 \cdots \oint d\theta_N \sum_{l=1}^{N} p_l \vec{\nabla} q_l \tag{5.111}$$

である．Stokes の定理を使用すると，

$$\Delta\theta_k(I,C) = -\frac{\partial}{\partial I_k}\iint_S \left(\sum_{l=1}^{N} \vec{\nabla} p_l \times \vec{\nabla} q_l\right)_{\mathrm{AV}} d\vec{S} \tag{5.112}$$

と表現できる．

これが，Hannay が見つけた古典的断熱過程に伴う角度のズレである：

$$\theta_k(T) = \theta_k(0) + \int_0^T \omega_k(I, \vec{R}(t))\, dt + \Delta\theta_k(I,C). \tag{5.113}$$

以前に論じた自由度 1 の調和振動子で角振動数 $\omega(t)$ を断熱パラメタとした場合，パラメタ空間は 1 次元だから，式 (5.112) は直ちに $\Delta\theta = 0$ を意味する．ゼロでない $\Delta\theta$ を得るためにはパラメタ空間は 2 次元以上でなければならない．

この節で紹介した式 (5.112) の導出方法は，Berry によるものである [23]．Hannay の原論文は [24] である．

5-3-2　Berry の位相の半古典極限としての Hannay の角度

ここでは，Berry の位相 $\gamma_m(C)$ に対する表式 (4.28) から出発する：

$$\gamma_m(C) = -\iint_S \vec{V}_m(\vec{R})\cdot d\vec{S}, \tag{5.114}$$

$$\begin{aligned}\vec{V}_m(\vec{R}) &= \mathrm{Im}[\vec{\nabla}\times\langle m,\vec{R}|\vec{\nabla}|m,\vec{R}\rangle] \\ &= \mathrm{Im}\vec{\nabla}\times\int \psi^\dagger(q,m,\vec{R})\vec{\nabla}\psi(q,m,\vec{R})\, dq.\end{aligned} \tag{5.115}$$

上式では，波動関数の引数依存性を明示した．式 (5.115) の第 1 行目の内積の記号は，第 2 行目のように座標 $q = (q_1, q_2, \cdots, q_N)$ についての積分を意味する．微分演算子 $\vec{\nabla}$ は $\vec{R}$ についてのものである．m は固有ベクトルを指定する量子数であり，一般に多成分 $(m_1, m_2, \cdots, m_N)$ である．(5.115) に波動関数の半古典極限の表式 (5.87)，(5.89)：

$$\psi(q, m, \vec{R}) = (2\pi)^{-N/2} \sum_{\lambda} \left| \det \frac{\partial \theta_k^{\lambda}(q, I, \vec{R})}{\partial q_i} \right|^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} K^{\lambda}(q, I, \vec{R}) \right) \tag{5.116}$$

を適用しよう．ここでは，θ と K を q の関数としてみているので，多価性による分枝を区別する上添字 λ が現れている．(5.115) の内積は，対応する各分枝 λ ごとの内積である．

さて (5.116) を (5.115) に代入すると，$\vec{R}$ に関する微分 $\vec{\nabla}$ は θ および K に作用する．θ に作用した場合は，内積が虚数部分を持たなくなる．したがって，この項は (5.115) に寄与しない．位相部分の K に $\vec{\nabla}$ が作用した結果は，(5.46) の右辺第 1 項である．この以前の表式を用いると，(5.115) は次のようになる：

$$\vec{V}_m(\vec{R}) = \vec{\nabla} \times \int dq_1 \int dq_2 \cdots \int dq_N \frac{1}{(2\pi)^N \hbar} \cdot \sum_{\lambda} \det\left(\frac{\partial \theta_k^{\lambda}}{\partial q_i} \right) \left(\vec{\nabla} K - \sum_l p_l \vec{\nabla} q_l \right). \tag{5.117}$$

積分変数を q から θ へ変換すると，

$$\vec{V}_m(\vec{R}) = \vec{\nabla} \times \frac{1}{(2\pi)^N \hbar} \oint d\theta_1 \oint d\theta_2 \cdots \oint d\theta_N \left(\vec{\nabla} K - \sum_l p_l \vec{\nabla} q_l \right) \tag{5.118}$$

となる．勾配の回転はゼロだから，上式括弧の中の第 1 項は消える．したがって，

$$\vec{V}_m(\vec{R}) = -\vec{\nabla} \times \frac{1}{(2\pi)^N \hbar} \oint d\theta_1 \oint d\theta_2 \cdots \oint d\theta_N \left(\sum_l p_l \vec{\nabla} q_l \right)$$
$$= -\frac{1}{(2\pi)^N \hbar} \oint d\theta_1 \oint d\theta_2 \cdots \oint d\theta_N \left(\sum_l \vec{\nabla} p_l \times \vec{\nabla} q_l \right)$$
$$= -\frac{1}{\hbar} \left(\sum_l \vec{\nabla} p_l \times \vec{\nabla} q_l \right)_{\mathrm{AV}} \tag{5.119}$$

という表現が得られる．平均 (AV) は θ についてのものである．したがって，

$$\gamma_m(C) = \frac{1}{\hbar} \iint_S \left(\sum_l \vec{\nabla} p_l \times \vec{\nabla} q_l \right)_{\mathrm{AV}} \cdot d\vec{S} \tag{5.120}$$

となる．この表式を (5.112) と比べて，

$$\frac{\partial}{\partial I_k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial m_k} \tag{5.121}$$

を用いると，

$$\Delta\theta_k(I, C) = -\frac{\partial}{\partial I_k} (\hbar \gamma_m(C))$$
$$= -\frac{\partial}{\partial m_k} \gamma_m(C) \tag{5.122}$$

が結論できる．これが，Berry の位相 $\gamma_m(C)$ と Hannay の角 $\Delta\theta_k(I, C)$ の間の関係式である [23].

5-3-3　磁場中のスピン

4-4-2 項で考察した量子力学のハミルトニアン

$$h(q, p, \vec{R}) = \vec{J} \cdot \vec{R} \tag{5.123}$$

から出発して，これに対応する古典力学系を調べよう [25] (q, p が何であるかは後でわかる)．そのために，スピン角運動量作用素 $\vec{J}$ の期待値

$$\vec{L} \equiv \int \psi^\dagger(q, t, \vec{R}) \vec{J} \psi(q, t, \vec{R})\, dq \tag{5.124}$$

を導入する．$\vec{L}$ の運動方程式を，波動関数 $\psi(q,t,\vec{R})$ の Schrödinger 方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t,\vec{R}) = h(q,p,\vec{R})\psi(q,t,\vec{R}) \tag{5.125}$$

から計算する：

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\vec{L} &= \int \left(\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^\dagger(q,t,\vec{R}) \right) \vec{J}\psi(q,t,\vec{R}) \right. \\ &\qquad \left. +\psi^\dagger(q,t,\vec{R})\vec{J}\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t,\vec{R}) \right) \right) dq \\ &= i\int \left(\psi^\dagger(q,t,\vec{R})h\vec{J}\psi(q,t,\vec{R}) \right. \\ &\qquad \left. -\psi^\dagger(q,t,\vec{R})\vec{J}\left(h\psi(q,t,\vec{R}) \right) \right) dq \\ &= i\int \psi^\dagger(q,t,\vec{R})[h,\vec{J}]\psi(q,t,\vec{R})\, dq. \end{aligned} \tag{5.126}$$

ハミルトニアン h とスピン角運動量作用素 $\vec{J}$ との交換子は，例えば

$$\begin{aligned}[h,J_1] &= \left[\sum_{k=1}^{3} R_k J_k, J_1 \right] \\ &= R_2[J_2,J_1] + R_3[J_3,J_1] \\ &= -iR_2J_3 + iR_3J_2 \\ &= -i(\vec{R}\times\vec{J})_1 \end{aligned} \tag{5.127}$$

等により，

$$[h,\vec{J}] = -i(\vec{R}\times\vec{J}) \tag{5.128}$$

である．したがって，

$$\frac{d}{dt}\vec{L} = \vec{R}\times\vec{L} \tag{5.129}$$

と結論できる．これから

$$\frac{d}{dt}(\vec{L}\cdot\vec{L}) = 0 \tag{5.130}$$

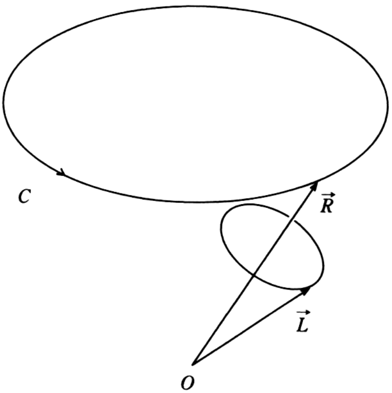


図 5-3　$\vec{L}$ は「外部磁場」 $\vec{R}$ の軸の周りを $\vec{R}\cdot\vec{L}$ を一定に保ちながら回転する．この周期は，$\vec{R}$ がループ C を一周する時間 T と比べるとはるかに小さい．

がわかる．$\vec{L}$ の大きさ L は時間的に不変である．

古典力学的量 $\vec{L}$ の運動方程式 (5.129) に対応する古典力学的ハミルトニアンは，(5.123) の期待値から

$$h(q,p,\vec{R}) = \vec{R}\cdot\vec{L} \tag{5.131}$$

である．$\vec{L}$ の運動のイメージは次のようなものである：外部パラメタ (磁場) $\vec{R}$ 軸の周りを $\vec{L}$ が内積 $\vec{R}\cdot\vec{L}$ を一定に保ちながら回転する．そしてこの軸 $\vec{R}$ はゆっくりと長時間 T の間に実験室系 (laboratory frame) でループ C を描く (図 5-3)．

パラメタ $\vec{R}$ の配置を図 5-4 のように角度 ϑ と φ で指定する．

$\vec{R}$ と直交し，また互いにも直交する 2 つのベクトル $\vec{a},\vec{b}$ を選ぶ (図 5-5)．この組 $(\vec{a},\vec{b},\vec{R})$ で決まるフレームは $\vec{R}$ とともにゆっくり実験室系で回転する．このフレームをコマの運動の場合と同様に剛体系 (body frame) と呼ぶ．

一方，$\vec{L}$ の方は実験室系で方位角 ϕ を持ち，剛体系で方位角 θ を持つとする．スピン $\vec{L}$ が時間 T の間にどれだけ回転したかを測る量が θ の総変化量である．なお，時間 T で $\vec{R}$ は元の位置へ戻ってくるので，θ を測る基準線

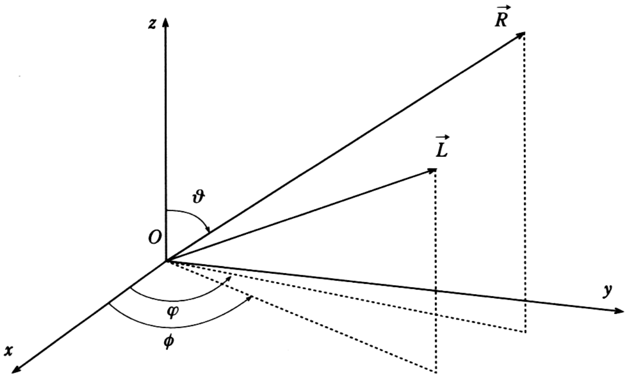


図 5-4　実験室系における $\vec{R}$ と $\vec{L}$ の配置.

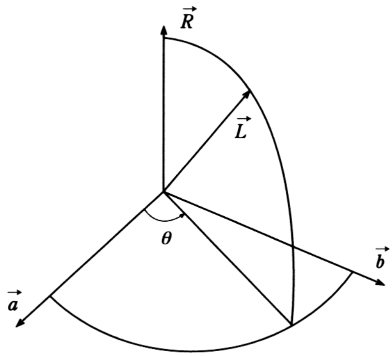


図 5-5　剛体系は $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{R})$ で決まるフレームである.

としての $\vec{a}$ の選択は任意である (もちろん $\vec{a}$ が $\vec{R}$ に直交する範囲内で). つまり, 時間 T の間の, θ の総変化量は $\vec{a}$ の選択の任意性に依存しない.

さて, $\vec{R}$ はその大きさ R と角度 ϑ, φ で表現することにする :

$$\vec{R} = R(\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta). \tag{5.132}$$

他方, $\vec{L}$ の方は, その大きさ L と実験室系の z 成分と角度 ϕ で表現する :

$$\vec{L} = (\sqrt{L^2 - L_z^2}\cos\phi, \sqrt{L^2 - L_z^2}\sin\phi, L_z). \tag{5.133}$$

表式 (5.132) と (5.133) を (5.131) へ代入すると,

$$h = R(L_z \cos\vartheta + \sqrt{L^2 - L_z^2}\sin\vartheta\cos(\phi - \varphi)) \tag{5.134}$$

となる．ここでの力学変数は L_z と ϕ である．以上導入した量 $\vec{L}, \vec{a}, \vec{b}, \varphi, \vartheta, \phi$ はすべて $\vec{R}$ の関数であるが，この依存性は明示しないことにした．式が煩雑になるからである．なお，θ と後に出てくる断熱不変量 I は $\vec{R}$ とは独立な変数である．

そこで，ハミルトニアン (5.134) を L_z および ϕ で偏微分してみよう．次のようになる：

$$\begin{aligned}\frac{\partial h}{\partial \phi} &= -R\sqrt{L^2 - L_z^2}\sin\vartheta\sin(\phi - \varphi)\\ &= -(\vec{R} \times \vec{L})_z\\ &= -\frac{d}{dt}L_z,\end{aligned} \tag{5.135}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial h}{\partial L_z} &= R\left(\cos\vartheta - \frac{L_z}{\sqrt{L^2 - L_z^2}}\sin\vartheta\cos(\phi - \varphi)\right)\\ &= \frac{d}{dt}\phi.\end{aligned} \tag{5.136}$$

式 (5.135) で 1 行目から 2 行目に移るときに，表式 (5.132) と (5.133) を用いる．式 (5.136) で 1 行目から 2 行目へ移るときには，

$$\phi = \arctan\frac{L_y}{L_x} \tag{5.137}$$

の時間微分を運動方程式によって計算すればよい．

式 (5.135) と (5.136) は正準方程式であり，ϕ と L_z が一般化座標とその正準共役運動量になっていることを示している (この系の自由度は 1 である)．

$$q = \phi, \tag{5.138}$$

$$p = L_z. \tag{5.139}$$

この系の作用変数と角変数を決定しよう．外部パラメタ $\vec{R}$ を一定と見なしたとき，新しい変数で書き直したハミルトニアン H に含まれていない座標を角変数として採用し得る［5-1-4 項 b］．式 (5.131) から，

$$H = RL_\zeta \tag{5.140}$$

である．L_ζ は剛体系での $\vec{L}$ の ζ 成分 ($\vec{R}$ 方向の成分) である．したがって H には L_ζ に共役な方位角 θ が含まれていない．θ と L_ζ が共役の関係にあることは，次のようにすればすぐにわかる．$\vec{R}$ は一定と見なしているので，これを実験室系の z 軸に選んでも一般性は失われない．そうすると，この場合，実験室系と剛体系は同一のものである．特に，$\phi = \theta, L_z = L_\zeta$ である．ϕ と L_z が共役だから，当然 θ と L_ζ は共役である．

結局，角変数 θ に対応する作用変数は

$$I = L_\zeta = \frac{\vec{R}}{R} \cdot \vec{L} \tag{5.141}$$

であり，

$$H = IR \tag{5.142}$$

となる．R を一定と見なした場合，角変数 θ の時間変化率は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\theta = \frac{\partial H}{\partial I} &= R \\ &\equiv \omega \end{aligned} \tag{5.143}$$

である．したがって，

$$\omega(\vec{R}(t)) = |\vec{R}(t)| \tag{5.144}$$

である．

さて，時間 T に対する θ の総変化量

$$\theta(T) - \theta(0) = \int_0^T \omega(\vec{R}(t))\, dt + \Delta\theta(I, C) \tag{5.145}$$

のうちの $\Delta\theta$ を式 (5.112) に基づいて計算しよう：

$$\Delta\theta(I, C) = -\frac{\partial}{\partial I} \iint (\vec{\nabla} L_z \times \vec{\nabla}\phi)_{\mathrm{AV}} \cdot d\vec{S}. \tag{5.146}$$

ここで，$\vec{\nabla}$ は $\vec{R}$ に関する微分である．平均化 (AV) は θ の一周期についてである．

このために，まず $\vec{L}$ の実験室系での成分表示，

$$\vec{L} = (\sqrt{L^2 - L_z^2}\cos\phi, \sqrt{L^2 - L_z^2}\sin\phi, L_z) \tag{5.147}$$

から，

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}L_x &= \sqrt{L^2 - L_z^2}(-\sin\phi)\vec{\nabla}\phi + \frac{-L_z}{\sqrt{L^2 - L_z^2}}\cos\phi\vec{\nabla}L_z \\ &= -L_y\vec{\nabla}\phi - \frac{L_z\cos\phi}{\sqrt{L^2 - L_z^2}}\vec{\nabla}L_z\end{aligned} \tag{5.148}$$

と計算し，

$$\vec{\nabla}L_z \times \vec{\nabla}\phi = -\frac{1}{L_y}\vec{\nabla}L_z \times \vec{\nabla}L_x \tag{5.149}$$

を導く．

次に，

$$\begin{aligned}\vec{L} &= \sqrt{L^2 - L_\zeta^2}\cos\theta\,\vec{a} + \sqrt{L^2 - L_\zeta^2}\sin\theta\,\vec{b} + L_\zeta\vec{R}/R \\ &= L_\perp\cos\theta\,\vec{a} + L_\perp\sin\theta\,\vec{b} + I\vec{R}/R\end{aligned} \tag{5.150}$$

と表示する．ここで，

$$L_\perp = \sqrt{L^2 - I^2} \tag{5.151}$$

と定義した．I が断熱不変量なので，$L_\perp$ も同様である．$\vec{R}$ に応じて決まる $\vec{a}, \vec{b}$ の実験室系の成分を次のように選ぶ：

$$\vec{a} = (\cos\vartheta\cos\varphi, \cos\vartheta\sin\varphi, -\sin\vartheta), \tag{5.152}$$

$$\vec{b} = (\sin\varphi, -\cos\varphi, 0). \tag{5.153}$$

この $\vec{a}, \vec{b}$ の選択には，$\vec{R}$ に垂直な平面内での回転の自由度だけの任意性がある．しかし，$\Delta\theta$ の計算の結果は，この任意性とは無関係になる．

式 (5.132) および上の 3 つの式 (5.150)(5.152)(5.153) により，$\vec{L}$ の実験室系での成分が次のように求まる：

$$\begin{aligned} L_x &= L_\perp \cos\theta \cos\vartheta \cos\varphi \\ &\quad + L_\perp \sin\theta \sin\vartheta + I \sin\vartheta \cos\varphi, \end{aligned} \tag{5.154}$$

$$\begin{aligned} L_y &= L_\perp \cos\theta \cos\vartheta \sin\varphi \\ &\quad - L_\perp \sin\theta \cos\varphi + I \sin\vartheta \sin\varphi, \end{aligned} \tag{5.155}$$

$$L_z = -L_\perp \cos\theta \sin\vartheta + I \cos\vartheta. \tag{5.156}$$

$\vec{L}$ の上記の成分表示の項で $\vec{R}$ に陽に依存するのは，ϑ と φ である．$\vec{\nabla}$ を作用させると，

$$\vec{\nabla} L_x = L_z \cos\varphi \vec{\nabla}\vartheta - L_y \vec{\nabla}\varphi, \tag{5.157}$$

$$\vec{\nabla} L_z = (-L_\perp \cos\theta \cos\vartheta - I \sin\vartheta)\vec{\nabla}\vartheta \tag{5.158}$$

となる．したがって，(5.157) と (5.158) を (5.149) へ代入すると，

$$\vec{\nabla} L_z \times \vec{\nabla}\phi = -(L_\perp \cos\theta \cos\vartheta + I \sin\vartheta)\vec{\nabla}\vartheta \times \vec{\nabla}\varphi \tag{5.159}$$

であり，θ について一周期の平均をとると，

$$(\vec{\nabla} L_z \times \vec{\nabla}\phi)_{\mathrm{AV}} = -I \sin\vartheta\, \vec{\nabla}\vartheta \times \vec{\nabla}\varphi \tag{5.160}$$

となる．

さて，$\vec{R}$ を球座標 R, ϑ, φ で表現した式 (5.132) を逆に解く：

$$\begin{aligned} \vartheta &= \arccos\left(\frac{R_z}{\sqrt{R_x^2 + R_y^2 + R_z^2}}\right), \\ \varphi &= \arctan\left(\frac{R_y}{R_x}\right), \\ R &= \sqrt{R_x^2 + R_y^2 + R_z^2}. \end{aligned} \tag{5.161}$$

これらに $\vec{\nabla}$ を作用させると，

$$\vec{\nabla}\vartheta = \frac{1}{R^2\sqrt{R_x^2 + R_y^2}}(R_z R_x, R_z R_y, R_x^2 - R_y^2),$$
$$\vec{\nabla}\varphi = \frac{1}{R_x^2 + R_y^2}(-R_y, R_x, 0) \tag{5.162}$$

となるので，

$$\sin\vartheta\,\vec{\nabla}\vartheta \times \vec{\nabla}\varphi = \frac{\vec{R}}{R^3} \tag{5.163}$$

を得る．(5.160) に (5.163) を用いて (5.146) に代入すると，

$$\Delta\theta(I, C) = -\frac{\partial}{\partial I}\iint_S (-I)\frac{\vec{R}}{R^3}\cdot d\vec{S}$$
$$= \Omega(C) \tag{5.164}$$

という結論を得る．$\Omega(C)$ は閉曲線 C を $\vec{R}$ 空間の原点からみる立体角である．
(5.164) に対応する Berry の位相は (4.135) である：

$$\gamma_M(C) = -M\Omega(C).$$

したがって，関係式 (5.122) が成立していることが確認できる [25]：

$$\Delta\theta(I, C) = -\frac{\partial}{\partial M}\gamma_M(C).$$

次章から少し話題が変わる．ここで，Berry の位相に関する紹介記事として [26]，[27]，また Berry 自身による専門家向けでない記事として [28] があることを記しておこう．初期の代表的な論文のいくつかが [18] に収録されていることは前にも述べた．日本語での専門的な総合報告としては [29]，[30] がある．

第 6 章

多重連結領域での量子力学

6-1 節　準備 (径路積分)

Feynman が定式化した量子力学 [31] は次の積分から出発する：

$$\psi(q,t) = \int K(q,t;q_0,t_0)\psi(q_0,t_0)\,dq_0, \tag{6.1}$$

$$K(q,t;q_0,t_0) = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[\widetilde{q}]\right) D\widetilde{q}, \tag{6.2}$$

$$S[\widetilde{q}] = \int_{t_0}^{t} L(\widetilde{q},\dot{\widetilde{q}};t')\,dt', \tag{6.3}$$

ただし，$\widetilde{q}(t_0) = q_0, \widetilde{q}(t) = q, t_0 < t.$

式 (6.1) は Schrödinger 波動関数 $\psi(q,t)$ をある与えられた初期値 $\psi(q_0,t_0)$ に対して決定する式である．この式の積分核 $K(q,t;q_0,t_0)$ は，系が (q_0,t_0) から (q,t) へ移行する確率振幅という意味を持つ．つまり，時刻 t_0 に粒子が座標 q_0 に存在した場合の波動関数そのものである．この積分核 K は式 (6.2) で計算する．式 (6.2) の被積分量は作用 S の指数関数である．式 (6.3) は，第 5 章 5-2 節の半古典極限のところで定義した式 (5.97) と同一のものである．

さて，式 (6.2) が径路積分である．$D\widetilde{q}$ という記号は，図 6-1 のような (q_0,t_0) と (q,t) を結ぶすべての径路 $\widetilde{q}$ についての「和」をとることを意味する．こ

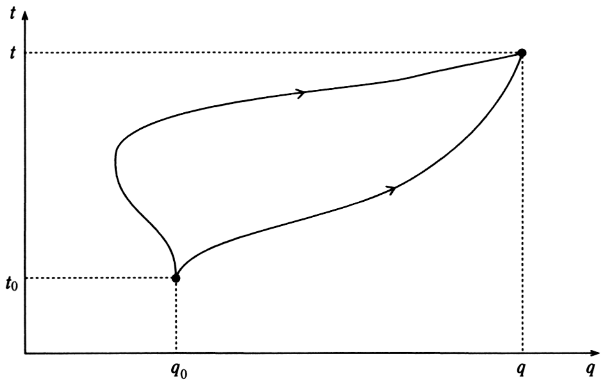


図 **6-1**　(q_0, t_0) から (q, t) に到る径路の例.

のアプローチにおいては，各径路からの寄与は位相因子 $\exp\bigl((i/\hbar)S[\tilde{q}]\bigr)$ のみである．この (6.2) の表式が Feynman の量子力学の礎石である．

具体的にはまず，図 6-2 のように，時刻 t_0 と t の間を n 分割し，径路上の座標を (t_i, q_i),　$i = 1, 2, \cdots, n$ と名付けて，積分 (6.2) と (6.3) を離散的にする：

$$D\tilde{q} = N \prod_{i=1}^{n-1} (N_i dq_i), \tag{6.4}$$

$$S = \sum_{i=1}^{n} L\left(\frac{q_i + q_{i-1}}{2}, \frac{q_i - q_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}, \frac{t_i + t_{i-1}}{2}\right)(t_i - t_{i-1}). \tag{6.5}$$

あとは，通常の積分を各々の q_i について行えばよい．ラグランジアン L は簡単な問題では，q および $\dot{q}$ について 2 次以下であるので，q_i についての積分は Gauss 積分に帰着して計算が実行できる．これらの積分が最後まで具体的に計算できない場合には，摂動論およびその他の近似方法を場合に応じて工夫することになる．一応積分ができたものとしよう．そうすると，次にすることは，$n \longrightarrow \infty$ として分割の幅をゼロに持っていくことである．このとき，i についての無限積は一般には収束しないが，式 (6.4) の「規格化」定数

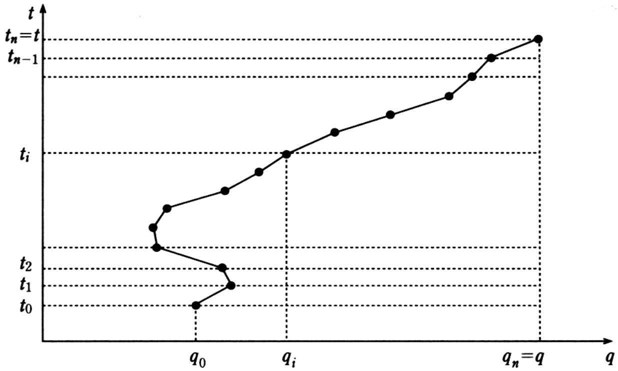


図 6-2　径路積分を離散化して計算する.

N と N_i を上手に選んで，無限積が物理的意味を持つ極限に収束するように調整する.

なお，径路積分を離散化する方法は一意的ではない．これに関連する問題，および径路積分における境界条件，変数変換等について気になる人は [32] を見るとよいだろう.

Feynman の量子力学は式 (6.2) の径路積分から出発するわけだが，式 (6.2) で決定される積分核 K を用いて求まる波動関数 (6.1) が Schrödinger 方程式を満たすことが次のようにしてわかる．記述を簡単にするため，自由度 1 の系を考え，そのラグランジアンは次の形であると仮定する：

$$L(q,\dot{q},t) = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q,t). \tag{6.6}$$

Schrödinger 方程式は微分方程式であるから，今ここで問題となるのは $\psi(q,t)$ に関して，q および t のそれぞれの注目する点の近傍の様子のみである．積分核 $K(q,t;q_0,t_0)$ についても同様である．したがって，$q-q_0=\Delta q$ および $t-t_0=\Delta t$ が十分小さいところだけを考えればよいので，

$$K(q,t;q_0,t_0) = N\exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta q}{\Delta t}\right)^2 - V(q,t)\right)\Delta t\right) \tag{6.7}$$

としてよいだろう．表式 (6.7) を用いると，波動関数は (6.1) から

$$\psi(q,t) = N\int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta q}{\Delta t}\right)^2 - V(q,t)\right)\Delta t\right) \cdot\psi(q-\Delta q, t-\Delta t)\, d(\Delta q) \tag{6.8}$$

である．ここで，Δq の大きいところからの寄与はいずれにせよ指数関数の急激な振動のために無視できるので，Δq は $-\infty$ から $+\infty$ まで積分してもよいとしよう．この式を Δq について展開すると，

$$\begin{aligned}\psi(q,t) &= N\int d(\Delta q)\exp\left(\frac{im(\Delta q)^2}{2\hbar\Delta t}\right)\exp\left(-\frac{i\Delta t}{\hbar}V(q,t)\right) \\ &\quad\cdot\Big(\psi(q,t-\Delta t) - \Delta q\nabla\psi(q,t-\Delta t) \\ &\qquad + \frac{1}{2}(\Delta q)^2\nabla^2\psi(q,t-\Delta t) + O((\Delta q)^3)\Big)\end{aligned} \tag{6.9}$$

となる．Δq についての積分は実行できて，

$$\begin{aligned}\psi(q,t) &= N\exp\left(-\frac{i\Delta t}{\hbar}V(q,t)\right) \\ &\quad\cdot\left(\psi(q,t-\Delta t)\left(\frac{2\pi\hbar\Delta t}{m}i\right)^{1/2}\right. \\ &\qquad\left. + \frac{1}{2}\Delta\psi(q,t-\Delta t)\left(\frac{\hbar\Delta t}{m}i\right)\left(\frac{2\pi\hbar\Delta t}{m}i\right)^{1/2} + O((\Delta t)^{5/2})\right)\end{aligned} \tag{6.10}$$

となる．

Δq に関する積分は，次のような結果を利用すればよい：

$$\int_{\infty}^{\infty} \exp(iax^2)dx = \left(\frac{\pi i}{a}\right)^{1/2}, \tag{6.11}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(iax^2)dx = \left(\frac{i}{2a}\right)\left(\frac{\pi i}{a}\right)^{1/2}, \tag{6.12}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp(iax^2)dx = \left(\frac{-3}{4a^2}\right)\left(\frac{\pi i}{a}\right)^{1/2}. \tag{6.13}$$

上のような積分公式で，x の奇数ベキと指数関数の積の積分は，奇関数の区間 $(-\infty,\infty)$ での積分なので消える．最後の式 (6.13) は (6.10) の最後の項のオーダーの評価に使える．

$\Delta t \longrightarrow 0$ で式 (6.10) の両辺が一致するということから，

$$N = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{1/2} \tag{6.14}$$

である．式 (6.10) はさらに Δt で展開すると，

$$\begin{aligned}
&\psi(q,t)\\
&= \left(1 - \frac{i\Delta t}{\hbar}V(q,t)\right)\\
&\quad \cdot\left(\psi(q,t-\Delta t) + \frac{1}{2}\Delta\psi(q,t,-\Delta t)\left(\frac{\hbar\Delta t}{m}i\right) + ((\Delta t)^2)\right)
\end{aligned} \tag{6.15}$$

となり，

$$\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\psi(q,t)-\psi(q,t-\Delta t)}{\Delta t}\\
&= \frac{(i\hbar\nabla)^2}{2m}\psi(q,t-\Delta t) + V(q,t)\psi(q,t-\Delta t) + O(\Delta t)
\end{aligned} \tag{6.16}$$

から，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(q,t)\right)\psi(q,t) \tag{6.17}$$

という Schr¨odinger 方程式が出てくる．

このことから，表式 (6.1) は Schrödinger の微分方程式 (6.17) の積分形と見なせる．

以上は Lagrange 形式での径路積分であるが，Hamilton 形式でも同様の定式化ができる．例えば，ラグランジアン (6.6) に対応するハミルトニアン

$$
\begin{aligned}
H(q,p,t) &= p\dot{q} - L \\
&= \frac{1}{2m}p^2 + V(q,t)
\end{aligned} \tag{6.18}
$$

を用いて，次の径路積分を考えてみよう：

$$
K'(q,t;q_0,t_0) = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}A[\widetilde{q},\widetilde{p}]\right) D\widetilde{q}D\widetilde{p}, \tag{6.19}
$$

$$
\begin{aligned}
&A[\widetilde{q},\widetilde{p}] = \int_{t_0}^{t}\left(\dot{\widetilde{q}}\widetilde{p} - H(\widetilde{q},\widetilde{p},t')\right)dt', \\
&\text{ただし，}\ \widetilde{q}(t_0) = q_0, \widetilde{q}(t) = q, t_0 < t.
\end{aligned} \tag{6.20}
$$

ここでは，座標 $\widetilde{q}$ と運動量 $\widetilde{p}$ の各々の径路について積分を行う．(6.20) の被積分関数は

$$
\begin{aligned}
\widetilde{p}\dot{\widetilde{q}} - H(\widetilde{q},\widetilde{p},t') &= \widetilde{p}\dot{\widetilde{q}} - \left(\frac{1}{2m}\widetilde{p}^2 + V\right) \\
&= -\frac{1}{2m}(\widetilde{p} - m\dot{\widetilde{q}})^2 + \left(\frac{1}{2}m\dot{\widetilde{q}}^2 - V\right) \\
&= -\frac{1}{2m}(\widetilde{p} - m\dot{\widetilde{q}})^2 + L(\widetilde{q},\dot{\widetilde{q}},t')
\end{aligned} \tag{6.21}
$$

である．したがって，式 (6.19) は

$$
\begin{aligned}
K' = \int &\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\frac{-1}{2m}(\widetilde{p} - m\dot{\widetilde{q}})^2\,dt'\right) \\
&\cdot\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}L(\widetilde{q},\dot{\widetilde{q}},t')dt'\right)D\widetilde{q}D\widetilde{p}
\end{aligned} \tag{6.22}
$$

となる．積分変数を $\widetilde{p}$ の代わりに

$$
\widetilde{p} \longrightarrow \widetilde{p}' = \widetilde{p} - m\dot{\widetilde{q}}
$$

とすると，

$$K' = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\frac{-1}{2m}(\widetilde{p}')^2 dt'\right) D\widetilde{p}'$$
$$\cdot \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} L(\widetilde{q}, \dot{\widetilde{q}}, t')dt'\right) D\widetilde{q}$$
$$= \text{constant} \cdot \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(\widetilde{q})\right) D\widetilde{q} \tag{6.23}$$

となるので，この K' は式 (6.2) の K と定数因子を除いて一致する．径路積分のアプローチにおいては通常，定数因子の不定性は波動関数の規格化等によって調整できるので，Hamilton 形式での表式 (6.19) は Lagrange 形式の表式 (6.2) と同じものと見なしてよい．つまり，Hamilton 形式においては，Feynman の量子力学は式 (6.1) と (6.19) を出発点とする．

径路積分については，すでによいテキストが幾つか出版されている．Feynman と Hibbs による教科書が [33] である．最近の多方面への応用および数学的に厳密な取扱い方法の紹介等については，例えば [34] を参照するとよいだろう．

6-2 節　トーラス上の自由粒子

まず 2 次元平面上の自由粒子のラグランジアン

$$L = \frac{m}{2}\dot{\vec{q}}^2 \tag{6.24}$$

に対して，Feynman の積分核 K を計算しておこう．前節の方法によって，時刻 t_0 と t の間を n 等分し，

$$\Delta t = \frac{t - t_0}{n} \tag{6.25}$$

とおく．式 (6.4) と (6.5) に対応して，

$$D\widetilde{q} = N^n \prod_{i=1}^{n-1} d\vec{q}_i, \tag{6.26}$$

$$S = \frac{m}{2}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\vec{q}_i - \vec{q}_{i-1}}{\Delta t}\right)^2 \Delta t \tag{6.27}$$

とする．このとき，$K(q,t;q_0,t_0)$ は次の式によって与えられる：

$$\begin{aligned} &K(q,t;q_0,t_0) \\ &= \lim_{n\to\infty} \int \cdots \int \exp\left(\frac{im}{2\hbar\Delta t}\sum_{i=1}^{n}(\vec{q}_i - \vec{q}_{i-1})^2\right) \\ &\qquad \cdot N^n d\vec{q}_1 \cdots d\vec{q}_{n-1}. \end{aligned} \tag{6.28}$$

$\vec{q}_i$ に関する積分は，$\vec{q}_1$ から順に各々Gauss 積分 (6.11) に帰着させて計算できる．その結果は，

$$K(q,t;q_0,t_0) = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{2\pi i\hbar n\Delta t}{m}\right)^{-1}\exp\left(\frac{im(\vec{q}_n - \vec{q}_0)^2}{2\hbar n\Delta t}\right) \tag{6.29}$$

である．このとき，規格化定数は

$$N = \frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t} \tag{6.30}$$

と選ぶ．式 (6.29) の極限は，式 (6.25) を用いて

$$K(q,t;q_0,t_0) = \frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\exp\left(\frac{im(\vec{q}-\vec{q}_0)^2}{2\hbar(t-t_0)}\right) \tag{6.31}$$

と決まる．

なお，ラグランジアンが

$$L = \frac{m_1}{2}\dot{q}_1^2 + \frac{m_2}{2}\dot{q}_2^2 \tag{6.32}$$

という形のときには，同様にして

$$\begin{aligned} K(q,t;q_0,t_0) &= \frac{\sqrt{m_1 m_2}}{2\pi i\hbar(t-t_0)} \\ &\quad \cdot \exp\left(i\frac{m_1(q_1-q_{10})^2 + m_2(q_2-q_{20})^2}{2\hbar(t-t_0)}\right) \end{aligned} \tag{6.33}$$

となる．また，3 次元空間中の自由粒子のラグランジアン

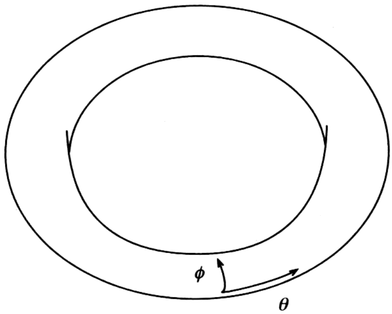


図 6-3　トーラス上の座標を θ, ϕ で指定する．$0 \leqq \theta < 2\pi$, $0 \leqq \phi < 2\pi$.

$$L = \frac{m}{2}\dot{\vec{q}}^2 \tag{6.34}$$

に対しては

$$K(q,t;q_0,t_0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_0 - t_0)}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{im(\vec{q}-\vec{q}_0)^2}{2\hbar(t-t_0)}\right) \tag{6.35}$$

となる．

次に，図 6-3 のようなトーラス上で自由粒子を考察する．そのラグランジアンを

$$L = \frac{A}{2}\dot{\theta}^2 + \frac{B}{2}\dot{\phi}^2 \tag{6.36}$$

とする．ここで，角度の変数 θ と ϕ は，図 6-4 で定義したものである． この図の OA と CB を同一視し，また同じように OC と AB を同一視して，図 6-3 のトーラスを作るものとする．図 6-4 およびこれと同値の図 6-3 において物理的な座標の範囲は

$$0 \leqq \theta < 2\pi, \qquad 0 \leqq \phi < 2\pi \tag{6.37}$$

である．

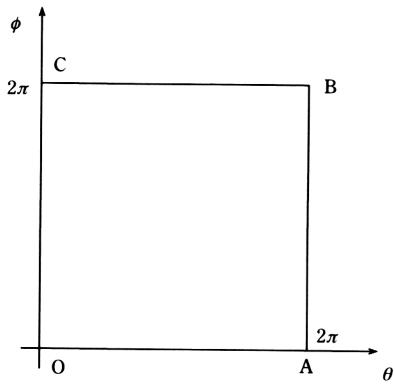


図 6-4　OA と CB を同一視し，また同様に OC と AB を同一視する．そうすると，OABC は図 6-3 のトーラスになる．

さて，ラグランジアン (6.36) に対する波動関数を考えよう．そのために，まず Feynman の積分核 $K_T(\theta,\phi,t;\theta_0,\phi_0,t_0)$ を計算する．この積分核 K_T は，時刻 t_0 に点 $P_0(\theta_0,\phi_0)$ から出発して，時刻 t に点 $P(\theta,\phi)$ に達するすべての径路についての和を式 (6.2) で計算すれば求まる．ここで，(θ_0,ϕ_0) も (θ,ϕ) もともに条件 (6.37) を満たすとする．

トーラス上で点 P_0 から点 P へ行く径路は，θ および ϕ 方向に何回転するかによって分類できる．この状況は図 6-5 のように θ-ϕ 平面全体で考えた方が見通しがよくなる．この図で，点 P に対応する点 P_{mn} は座標 $(\theta+2m\pi,\phi+2n\pi)$ を持つ．点 P_{mn} は，点 $P(\theta,\phi)$ からさらにトーラス上で θ 方向に m 回転，ϕ 方向に n 回転して到達する点を表している．図 6-5 の θ-ϕ 平面上で点線で囲まれた各格子中に 1 点ずつ P の対応点が存在する．点 P_{mn} $(m=0,\pm1,\pm2,\cdots;n=0,\pm1,\pm2,\cdots)$ はすべて物理的には点 P と同一のものである．θ-ϕ 座標の原点のとり方は自由だから，出発点の P_0 は図 6-5 においても条件 (6.37) の範囲内にあるとして一般性を失わない．

したがって，K_T に寄与する径路の集合は，θ-ϕ 平面上で考えると，点 P_0 から点 P_{mn} $(m=0,\pm1,\pm2,\cdots;n=0,\pm1,\pm2,\cdots)$ へ到る径路の集合ということになる．特に，点 P_0 からあるひとつの点 P_{mn} へ達する径路全体から

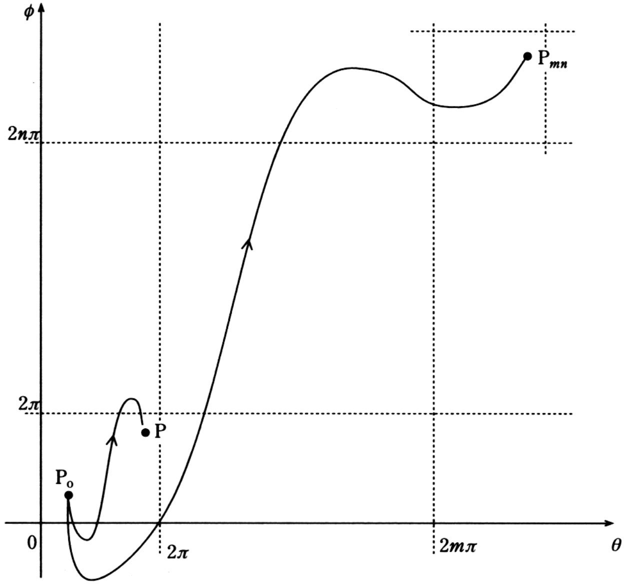


図 6-5　出発点の P_0 (θ_0, ϕ_0) は $0 \leqq \theta_0 < 2\pi$，$0 \leqq \phi_0 < 2\pi$ の範囲内にあるとする．この P_0 から出発してトーラスを θ 方向に m 回転，ϕ 方向に n 回転して到達する終点の P を P_{mn} とする．

の K_T への寄与は，前節の結果 (6.33) により，

$$K_{mn} = \frac{\sqrt{AB}}{2\pi i\hbar(t-t_0)} \cdot \exp\left(\frac{i}{2\hbar(t-t_0)}\left(A(\theta+2m\pi-\theta_0)^2 + B(\phi+2n\pi-\phi_0)^2\right)\right) \tag{6.38}$$

である．したがって，

$$K_T = \sum_{m,n} K_{mn} \tag{6.39}$$

となる．

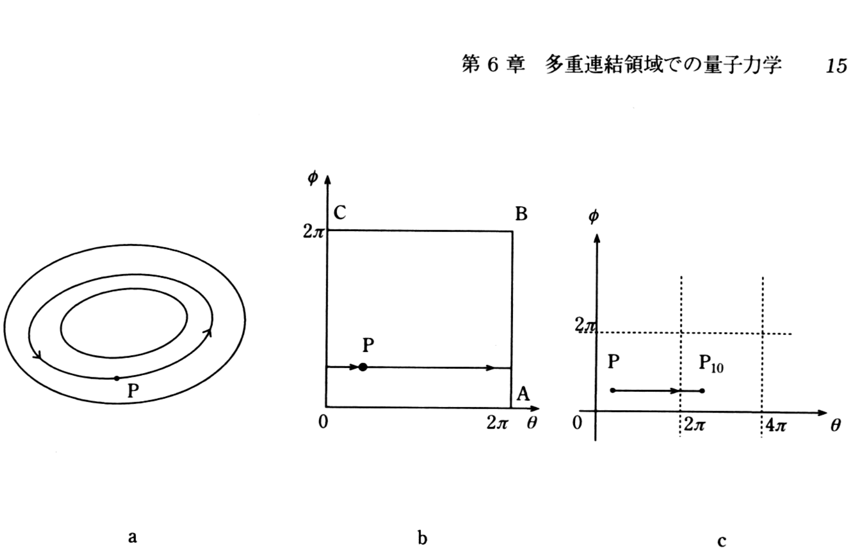


図 6-6　これらの図中の a，b，c はどれも，トーラス上を θ 方向に一周する状況を表現している．

さて，K_{mn} はそれ自身で Schrödinger 方程式を満たす．この事実は前節の議論からもわかるが，直接計算しても確かめられる．このことから，

$$K_T = \sum_{m,n} c_{mn} K_{mn} \tag{6.40}$$

という具合に，各 K_{mn} に定数係数 c_{mn} の比重を付けて和をとってもよさそうに思える．しかし，次のように考えるとすべての m と n について c_{mn} は互いに等しい，つまり c_{mn} は定数ということが結論できる．

図 6-6a のように，$K_T(\theta, \phi, t; \theta_0, \phi_0, t_0)$ の引数の θ を増加させ，トーラス上で一周させる (ϕ は固定しておく) とき，K_T の値がどう変化するかを考えてみよう．K_T が一価関数でなければならないと仮定すると，θ を一周させると K_T の値は元へ戻るはずである (図 6-6b)．一方，K_{mn} の値の変化を追っていくと，どうだろうか．K_{mn} は θ-ϕ 平面上での径路積分で求まった関数である．θ-ϕ 平面上では，θ は $\theta + 2\pi$ と変化し，P_{mn} は $\mathrm{P}_{m+1,n}$ へ移動している (図 6-6c)．したがって，K_{mn} の値 $K_{mn}(\theta, \phi)$ は $K_{mn}(\theta+2\pi, \phi) = K_{m+1,n}(\theta, \phi)$ に変化する．つまり，

$$K_T(\theta,\phi) \longrightarrow K_T(\theta,\phi) = \sum_{m,n} c_{mn} K_{m+1,n}(\theta,\phi)$$
$$= \sum_{m,n} c_{m-1,n} K_{mn}(\theta,\phi) \qquad (6.41)$$

である．各々の K_{mn} は互いに独立な関数であるので，c_{mn} はすべての m について互いに等しくなけれならない．同様の議論を ϕ について行うと，結局すべての c_{mn} が互いに等しくなる．したがって，式 (6.40) は式 (6.39) でなければならないということになる．なお，径路積分の全体の規格化定数はこの段階では決まらなくてもかまわない．この定数は波動関数 (6.1) の規格化から決定すればよい．

なお，K_T に対して 1 価性を要求しないことにすると，

$$c_{mn} = c \cdot \exp(i\mu m + i\nu n)$$

という形が許される．このとき，例えば θ 方向へ 1 周すると K_T は位相が μ だけ変化して，

$$K_T(\theta + 2\pi, \phi) = e^{-i\mu} K_T(\theta,\phi)$$

となる．しかし，元々の Feynman の径路積分の考えにおいては，径路についての和の比重のようなものがきっちりとは規定されていないとはいえ，このようないわば勝手な比重 $\exp(i\mu m + i\nu n)$ は排除されているように思える．一方，第 2 章の Dirac の考えに従うと，このような非可積分の位相の存在は，とりあえずは背景に電磁場に関係していると見なされる (ただし今の場合，多重連結空間が舞台なので直ちにこの結論が得られないことは，以前に調べたとおりであるが)．そこで次節において，この種の問題を電磁場が存在する場合について調べてみよう．

6-3 節　Aharonov-Bohm 効果

Aharonov-Bohm 効果 (AB 効果) は，図 6-7 のような実験において生ずる．荷電粒子が源 A から出発して，スクリーン上の点 C に達する．このとき，2 つのスリット U と D の間には遮蔽された磁場 B が図 6-7 の紙面に垂直方向

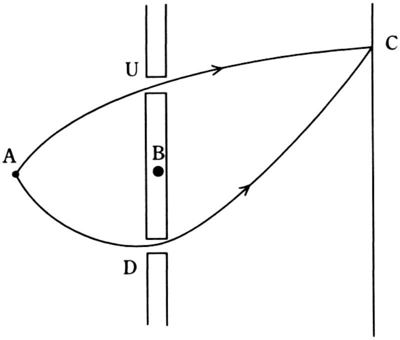


図 6-7　Aharonov-Bohm 効果の実験配置 (A は荷電粒子の源．U と D はスリット．B は遮蔽された磁場．C はスクリーン上の点)．

に存在するとする (B は時間的に一定で，その全磁束を Φ とする)．この磁場 $\vec{B}$ は荷電粒子が到達し得る場所では，完全にゼロになっているとする．しかし一方，ベクトル・ポテンシャル $\vec{A}$ は，荷電粒子が存在しうるところで，一般にはゼロとはならない．なぜならば，

$$\begin{aligned}\oint_C \vec{A}\cdot d\vec{s} &= \iint_S (\vec{\nabla}\times\vec{A})\cdot d\vec{S}\\ &= \iint_S \vec{B}\cdot d\vec{S}\\ &= \Phi \end{aligned} \tag{6.42}$$

であり，C は例えば径路 ADCUA である．

古典的常識に従えば，荷電粒子に対する電磁気の作用は電場 $\vec{E}$ と磁場 $\vec{B}$ によって生ずる．ベクトル・ポテンシャル A_μ は理論上の便宜的構成物に過ぎない．したがって，図 6-7 のような実験においては，荷電粒子は $\vec{E}$ および $\vec{B}$ がゼロのところを通過するわけだから，点 C での荷電粒子密度は Φ とは無関係のはずである．しかし，実験結果 [35] はこの見解を否定している．AB 効果の総合報告としては [36] がある．

そこで，この様子を見るために点 C での波動関数の値 $\psi(\vec{q},t)$ を計算しよう．まず，Feynman の積分核 K を求めることにする．電磁場と相互作用する電荷 e の荷電粒子のラグランジアンは

$$L = \frac{m}{2}\dot{\vec{q}}^2 + \frac{e}{c}\vec{A}\cdot\dot{\vec{q}} - eV \tag{6.43}$$

である． 3 次元座標 $\vec{q}$ に共役な運動量は

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{q}}} = m\dot{\vec{q}} + \frac{e}{c}\vec{A} \tag{6.44}$$

であり，ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= \vec{p}\cdot\dot{\vec{q}} - L \\ &= \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + eV \end{aligned} \tag{6.45}$$

である．AB 効果の場合は，スカラー・ポテンシャル V はゼロである．

ラグランジアン (6.43) から離散化した作用 (6.5) を計算すると，

$$S = S_0 + \frac{e}{c}\sum_{i=1}^{n}\vec{A}\left(\frac{\vec{q}_i + \vec{q}_{i-1}}{2}\right)\cdot\frac{\vec{q}_i - \vec{q}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}(t_i - t_{i-1}) \tag{6.46}$$

となる．S_0 は自由粒子の作用である．第 2 項は $n \longrightarrow \infty$ の極限で

$$\frac{e}{c}\int_q \vec{A}(\vec{q})\cdot d\vec{q} \tag{6.47}$$

という径路 $\tilde{q}$ に沿う線積分になる．したがって，Feynman の積分核は

$$K = \int D\tilde{q}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S_0[\tilde{q}]\right)\exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\int_q \vec{A}(\vec{q})\cdot d\vec{q}\right) \tag{6.48}$$

という形になる．

さて，図 6-7 で点 A から点 C へいく径路は，B の回りをまわる回数 n ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$) によって類別できる［連続的な変形によって互いに移り変わりうる径路全体の集合はホモトピー類と呼ばれている］．ここでは，径路 AUC を基準径路として選ぶことにする．この径路を $\bar{q}$ と名付ける．この径路 $\bar{q}$ から連続的に変形して得られる径路はすべて 1 つの類に入る．この類を $n = 0$ の類とする．そうすると，径路 ADC は径路 AUC プラス径路 CUADC を連

続的に変形して得ることができる．したがって，径路 ADC は $n=+1$ の類に入る (反時計回りを正の方向とする)．ホモトピー類 n に属する径路全体からの積分核 K への寄与を K_n と書くことにする．積分核 K の 1 価性を仮定すると，前節 (6-2 節) と同様の議論によって

$$K = \sum_n K_n \tag{6.49}$$

となる．

次に，基準径路 $\bar{q}$ について，

$$\int_{\bar{q}} \vec{A}(\vec{q}) \cdot \vec{q} \equiv F \tag{6.50}$$

と定義しよう．そうすると，ホモトピー類 n に属するどの 1 つの径路についても，

$$\int_{\text{類 } n \text{ の 1 つの径路}} \vec{A}(\vec{q}) \cdot d\vec{q} \equiv F + n\Phi, n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{6.51}$$

となることがわかる．Φ は式 (6.42) で定義されている．したがって，ホモトピー類 n に属する径路全体からの式 (6.48) に対する寄与 K_n は

$$K_n = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}(F + n\Phi)\right) \cdot \int_{\text{類 } n \text{ の径路}} D\widetilde{q} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0[\widetilde{q}]\right) \tag{6.52}$$

となる．上式右辺の自由粒子に対する径路積分を K_n^0 と呼ぶことにする：

$$K_n^0 = \int_{\text{類 } n \text{ の径路}} D\widetilde{q} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0[\widetilde{q}]\right). \tag{6.53}$$

式 (6.52) と (6.53) から

$$K_n(\vec{q}, t; \vec{q}_0, t_0) = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}(F + n\Phi)\right) \cdot K_n^0(\vec{q}, t; \vec{q}_0, t_0) \tag{6.54}$$

である．ここで，今まで省略していた引数を明示した．$\vec{q}_0$ は点 A の座標であり，$\vec{q}$ は点 C の座標である．t_0 と t はそれぞれ，出発時刻と到着時刻である．

さて，式 (6.54) を (6.49) に代入した結果が座標 $\vec{q}$ について一価関数であることは，6-2 節と同様にして確かめられる．このとき，磁場のまわりを 1 回転すると $F \longrightarrow F+\Phi$ および $K_n^0 \longrightarrow K_{n+1}^0$ となることに注意すればよい．そこでも調べたように，Feynman の径路積分の考えでは表式 (6.49) のように和を計算して 1 価の波動関数を導くのが自然であると思える．他方，式 (6.49) の代わりに

$$K = \sum_n \exp(i\nu n) \cdot K_n$$

という和を採ると，積分核 K は 1 価ではなくなる．磁場のまわりを 1 周すると，

$$K \longrightarrow \exp(-i\nu) \cdot K$$

となる．第 2 章の Dirac の考えに従うと，多分，この非可積分位相 ν は磁束に繰り込んで $\Phi + (\hbar c/e)\nu$ を現実の磁束と見なければならないことになるだろう．

ベクトル・ポテンシャルがゼロの場合の Feynman の積分核 K_n^0 は，ちょうど Young の二重スリット実験の場合の積分核である (図 6-8 および図 1-1c)．自由粒子の作用 $S_0[\tilde{q}]$ は，径路 $\tilde{q}$ が古典力学の運動方程式を満たすとき極値 (今の場合最小値) をとる．径路 $\tilde{q}$ が古典論の径路から外れれば外れる程 $S_0[\tilde{q}]$ の値は大きくなり，K_n^0 への寄与は (指数の急激な振動のため) 小さくなる．したがって，主要な寄与は K_0^0 と K_1^0 である．

特に，時刻 t_0 に荷電粒子が点 $\mathrm{A}(q_0)$ から出発するとして，スクリーン上での波動関数の値 $\psi(q,t)$ を考えてみよう．このとき，波動関数は非常によい近似で，

$$\psi(q,t) \propto K_0^0 + K_1^0 \tag{6.55}$$

となり，これは第 1 章の

$$\psi = N(\psi_{\mathrm{a}} + \psi_{\mathrm{b}}) \tag{1.43}$$

に対応しているものである．また同様に，Aharonov-Bohm 効果の場合にはスクリーン上で波動関数は，

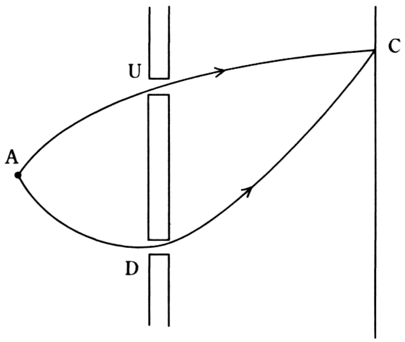


図 6-8　Young の 2 重スリットの実験配置 (A は粒子の源．U と D はスリット．C はスクリーン上の点)．

$$\psi(q,t) \propto \exp\left(\left(\frac{ieF}{\hbar c}\right)\right) K_0^0 + \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}(F+\Phi)\right) K_1^0 \quad (6.56)$$

となり，$|\psi|^2$ が磁束 Φ によって変化する干渉パターンを与える．

波動関数に対する式 (6.49) と (6.54) の構造を最初に論じたのは Schulman[37] と Berry[38] である．また，K_{-1}^0 と K_2^0 が［主要項 K_0^0 と K_1^0 に対する補正項として］，Schulman，Berry とは別の観点から，[39] で調べられている．

参考文献

[1] P.A.M.Dirac, "The Principles of Quantum Mechanics", 4th ed.(1958), Oxford Univ.Press (朝永, 玉木, 木庭, 大塚訳, 「量子力学」(1968), 岩波書店) ; L.I.Schiff, "Quantum Mechanics", 3rd ed. (1968), McGraw-Hill (井上訳, 「量子力学」(1957, 1958), 吉岡書店) ; 朝永振一郎, 「量子力学」(1952, 1953), みすず書房 ; L.D.Landau and E.M.Lifshitz, "Quantum Mechanics (Non - relativistic Theory)", 3rd ed. (1977), Pergamon Press (佐々木, 好村訳, 「量子力学」(1983), 東京図書) ; A.Messiah, "Mécanique Quantique" (1959), Dunod (小出, 田村訳, 「量子力学」(1971,1972), 東京図書).

[2] P.A.M.Dirac, Proc.Roy.Soc. A133 (1931) 60.

[3] M.Asorey, J.G.Esteve and A.F.Pacheco, Phys. Rev. D27 (1983) 1852.

[4] 江沢洋, "量子力学の構造", [湯川秀樹, 豊田利幸編, 「量子力学 II」, 岩波講座 現代物理学の基礎 第 4 巻, (第 2 版)] (1978), 岩波書店.

[5] I.Tamm, Z.Phys. 71 (1931) 141.

[6] S.Kobayashi and K.Nomizu, "Foundations of Differential Geometry" (1963,1969), John Wiley & Sons ; N.Steenrod, "The Topology of Fibre Bundles" (1951), Princeton Univ. Press; T.Eguchi, P.B.Gilkey and A.J.Hansen, Phys.Reports 66 (1980) 213.

[7] T.T.Wu and C.N.Yang, Phys.Rev.D12 (1975) 3845.

[8] S.Coleman, The Magnetic Monopoles Fifty Years Later, in "The Unity of the Fundamental Interactions" (pp.21-117) [Proceedings of the International School of Subnuclear Physics, 1981, Erice] ed. A.Zichichi (1983), Plenum Press.

[9] N.S.Manton, Annals of Physics 159 (1985) 220.

[10] 小谷, 梅沢, 小幡, 水野, 江沢, 「大学演習 量子力学」(1959), 裳華房.

[11] M.V.Berry, Proc.Roy.Soc.Lond. A392 (1984) 45.

[12] B.Simon, Phys.Rev.Lett. 51 (1983) 2167.

[13] M.V.Berry, The Quantum Phase, Five Years After (1988) [この論文は

[18] の中に収録されている].
[14] Y.Aharonov and J.Anandan, Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 1593.
[15] A.Tomita and R.Y.Chiao, Phys.Rev.Lett. 57 (1986) 937; R.Y.Chiao and Y.S.Wu, Phys.Rev.Lett. 57 (1986) 933.
[16] M.V.Berry, Nature 326 (1987) 277.
[17] P.G.Kwiat and R.Y.Chiao, Phys.Rev.Lett. 66 (1991) 588.
[18] A.Shapere and F.Wilczek, "Geometric Phases in Physics" (1989), World Scientific.
[19] P.A.M.Dirac, "Lectures on Quantum Mechanics" (1964), Belfer Graduate School of Science,Yeshiva University.
[20] L.D.Landau and E.M.Lifshits, "Mechanics", 3rd ed. (1976), Pergamon Press (広重, 水戸訳, 「力学」(1973), 東京図書).
[21] V.I.Arnold, "Mathematical Method of Classical Mechanics", 2nd ed. (1989), Springer Verlag (安藤, 蟹江, 丹羽訳, 「古典力学の数学的方法」(1980), 岩波書店).
[22] M.V.Berry, Semiclassical Mechanics of Regular and Irregular Motion, in "Chaotic Behaviour of Deterministic Systems" (pp.171 - 271), eds. Iooss, Helleman and Stora (1983), North-Holland.
[23] M.V.Berry, J.Phys. A18 (1985) 15.
[24] J.M.Hannay, J.Phys. A18 (1985) 221.
[25] M.V.Berry, Adiabatic Phase Shifts for Neutrons and Photons, in "Fundamental Aspects of Quantum Theory" (pp.267 - 278) [NATO ASI series, vol.144] eds. V.Gorini and A.Frigerio (1986), Plenum Press.
[26] 倉辻比呂志, パリティ 3 (1988) 26; 日本物理学会誌 47 (1992) 447.
[27] 青木秀夫, 数理科学 11 月号 no.341 (1991) 11.
[28] M.Berry, Physics Today,11 月号 (1990).
[29] 細野忍, 素粒子論研究 75 (1987) 37.
[30] 谷村省吾, 素粒子論研究 85 (1992) 1.
[31] R.P.Feynman, Rev.Mod.Phys. 20 (1948) 367.
[32] 崎田文二, 吉川圭二, 「径路積分による多自由度の量子力学」(1986), 岩波書店.
[33] R.P.Feynman and A.R.Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals" (1965), McGraw-Hill.
[34] L.S.Schulman, "Techniques and Applications of Path Integration" (1981), John Wiley and Sons.
[35] A.Tonomura et al., in "Foundations of Quantum Mechanics in the Light

of New Technology" (pp.20 - 28) [Proceedings of the International Symposium: Foundations of Quantum Mechanics, 1983] eds. S.Kamefuchi et al. (1984), 日本物理学会.

[36] M.Peshkin and A.Tonomura, "The Aharonov-Bohm Effect", Lecture Notes in Physics no.340 (1989), Springer.

[37] L.S.Schulman, J.Math.Phys. 12 (1971) 304.

[38] M.V.Berry, Eur.J.Phys. 1 (1980) 240.

[39] H.Yabuki, Int.J.Theor.Phys. 25 (1986) 159.

索引

●さ行

●た行

●は行

●ら行

矢吹治一 (やぶき はるいち)

略歴

1941 年　東京都に生まれる
1963 年　東京大学理学部物理学科を卒業
1968 年　東京大学大学院理学研究科博士課程を修了，理学博士
現在　兵庫教育大学教授

主な著書に『真空・物質・エネルギー/場の理論の系譜』『偏微分方程式の基礎と応用』(いずれもサイエンス社),『数理物理への誘い 2』(江沢洋編, 共著，遊星社).

量子論における位相　**数理物理シリーズ**

1998 年 9 月 30 日　第 1 版第 1 刷発行

著　者　矢 吹 治 一
発行者　大 石 進
発行所　株式会社 日本評論社
〒 170-8474 東京都豊島区南大塚 3-12-4
電話 (03)3987-8621 [販売]
(03)3987-8599 [編集]
印　刷　藤原印刷株式会社
製　本　松岳社

ISBN 4-535-78269-5